Bài tập và lời giải của các
Trường Đại học nổi tiếng Hoa Kỳ

Major American Universities Ph.D. Qualifying Questions and Solutions

BÀI TẬP VÀ LỜI GIẢI
CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

PROBLEMS AND SOLUTIONS ON
QUANTUM MECHANICS

Biên soạn:
Trường Đại học Khoa học
và Công nghệ Trung Hoa

Chủ biên:
Yung-Kuo Lim



NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

BÀI TẬP & LỜI GIẢI

CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

(Tái bản lần thứ nhất)

Người dịch:

NGUYỄN PHÚC DƯƠNG
PHẠM THÚC TUYỀN
NGUYỄN TOÀN THẮNG

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

Problems and Solutions on Quantum Mechanics

Compiled by
The Physics Coaching Class
University of Science and Technology of China

Edited by
Lim Yung-kuo
National University of Singapore

First published 1998
Reprinted 1999, 2000, 2002, 2005

114-2010/CXB/50-129/GD Mã số: 8Z079z0-SBQ

LỜI NHÀ XUẤT BẢN

*Bộ sách **Bài tập và lời giải Vật lý** gồm bảy cuốn:*

1. *Cơ học*
2. *Cơ học Lượng tử*
3. *Quang học*
4. *Nhiệt động lực học & Vật lý thống kê*
5. *Điện từ học*
6. *Vật lý Nguyên tử, Hạt nhân và Các hạt cơ bản*
7. *Vật lý chất rắn, Thuyết tương đối & Các vấn đề liên quan*

Đây là tuyển tập gồm 2550 bài tập được lựa chọn kĩ lưỡng từ 3100 đề thi vào đại học và thi tuyển nghiên cứu sinh chuyên ngành vật lý của 7 trường đại học nổi tiếng ở Mỹ (Đại học California ở Berkeley, Đại học Columbia, Đại học Chicago, Viện Công nghệ Massachusetts (MIT), Đại học Bang New York ở Buffalo, Đại học Princeton, Đại học Wiscosin). Trong số này còn có các đề thi trong chương trình CUSPEA và các đề thi do nhà vật lý đoạt giải Nobel người Mỹ gốc Trung Quốc C. C Ting (CCT) soạn để tuyển chọn sinh viên Trung Quốc đi du học ở Hoa Kỳ. Những đề thi này được xuất bản kèm theo lời giải của hơn 70 nhà vật lý có uy tín của Trung Quốc và 20 nhà vật lý nổi tiếng kiểm tra, hiệu đính. Tất cả các cuốn sách trên đã được tái bản, riêng cuốn Điện từ học đã được tái bản 6 lần.

Điểm đáng lưu ý về bộ sách này là nó bao quát được mọi vấn đề của vật lý học, từ cổ điển đến hiện đại. Bên cạnh những bài tập đơn giản nhằm khắc sâu những khái niệm cơ bản của Vật lý học, không cần những công cụ toán học phức tạp cũng giải được, bộ sách còn có những bài tập khó và hay, đòi hỏi phải có kiến thức và tư duy vật lý sâu sắc với các phương pháp và kĩ thuật toán học phức tạp hơn mới giải được. Có thể nói đây là một tài liệu bổ sung vô giá cho sách giáo khoa và giáo trình đại học ngành vật lý, phục vụ một phạm vi đối tượng rất rộng, từ các giáo viên vật lý phổ thông, giảng viên các trường đại học cho đến học sinh các lớp chuyên lý, sinh viên khoa vật lý và sinh viên các lớp tài năng của các trường đại học khoa học tự nhiên, đặc biệt là cho những ai muốn du học ở Mỹ.

Nhà xuất bản Giáo dục Việt Nam trân trọng giới thiệu bộ sách tới độc giả.

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

LỜI NÓI ĐẦU

Làm bài tập là một việc tất yếu và quan trọng trong quá trình học Vật lý nhằm củng cố lý thuyết đã học và trau dồi kĩ năng thực hành. Trong cuốn ***Cơ học Lượng tử*** *có 380 bài tập và lời giải: các nguyên lý cơ bản và chuyển động một chiều (72 bài), các thế xuyên tâm (27 bài), spin và mômen xung lượng (48 bài), chuyển động trong trường điện từ (16 bài), lý thuyết nhiễu loạn (83 bài), lý thuyết tán xạ và các chuyển dời lượng tử (61 bài), các hệ nhiều hạt (37 bài) và các chủ đề khác (40 bài). Hầu hết các bài chọn đưa vào cuốn sách này đều phù hợp với chương trình vật lý bậc đại học và sau đại học của chuyên ngành Cơ học Lượng tử. Ngoài ra, một số kết quả nghiên cứu gần đây cũng được đưa vào cuốn sách này, nhằm giúp người học không chỉ nắm bắt lý thuyết cơ bản mà còn có thể vận dụng kiến thức cơ bản một cách sáng tạo vào việc học tập và nghiên cứu.*

MỤC LỤC

PHẦN I

CÁC NGUYÊN LÝ CƠ BẢN VÀ CHUYỂN ĐỘNG MỘT CHIỀU

1001

Các hiện tượng lượng tử thường được bỏ qua trong thế giới vĩ mô. Bằng tính toán, hãy chứng tỏ điều đó cho các trường hợp sau:

(a) Biên độ dao động điểm không của một con lắc có chiều dài $l = 1$ m và khối lượng $m = 1$ kg.

(b) Xác suất xuyên ngầm của một hòn bi khối lượng $m = 5$ g chuyển động với vận tốc 10 cm/s tới một chướng ngại vật rắn có chiều cao $H = 5$ cm và chiều rộng $w = 1$ cm.

(c) Nhiễu xạ của một quả bóng tennis có khối lượng $m = 0,1$ kg chuyển động với vận tốc $v = 0,5$ m/s qua một cửa sổ có kích thước $1 \times 1,5$ m^2.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Lý thuyết về dao động tử điều hòa dẫn tới động năng trung bình là $\bar{V} = \frac{1}{2}E$, tức là, $\frac{1}{2}m\omega^2 A^2 = \frac{1}{4}\hbar\omega$, ở đây $\omega = \sqrt{g/l}$ và A là biên độ căn quân phương của dao động điểm không. Như vậy

$$A = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \approx 0,41 \times 10^{-17} \text{ m} .$$

Do đó, dao động điểm không của một con lắc vĩ mô có thể được bỏ qua.

(b) Nếu như ta coi chiều dài và chiều rộng của chướng ngại vật rắn là chiều dài và chiều rộng của một hàng rào thế trọng trường thì xác suất xuyên qua chướng ngại này là

$$T \approx \exp\left[-\frac{2w}{\hbar}\sqrt{2m\left(mgH - \frac{1}{2}mv^2\right)}\right]$$
$$= \exp\left(-\frac{2mw}{\hbar}\sqrt{2gH - v^2}\right) ,$$

ở đây

$$\frac{2mw}{\hbar}\sqrt{2gH - v^2} \approx 0,9 \times 10^{30} .$$

Do đó,

$$T \approx e^{-0,9\times 10^{30}} \approx 0$$

Điều này có nghĩa là xác suất để hòn bi xuyên qua chướng ngại vật thực tế là bằng không.

(c) Bước sóng de Broglie của quả bóng tennis là

$$\lambda = h/p = h/mv = 1,3 \times 10^{-30} \text{ cm},$$

và các góc nhiễu xạ theo phương ngang và dọc lần lượt là

$$\theta_1 \approx \lambda/D = 1,3 \times 10^{-32} \text{ rad}, \quad \theta_2 \approx \lambda/L = 9 \times 10^{-33} \text{ rad}.$$

Như vậy, theo cả hai phương đều không có nhiễu xạ.

1002

Hãy biểu diễn các đại lượng dưới đây theo $\hbar$, e, c, m = khối lượng electron, M = khối lượng proton. Cho đánh giá thô về độ lớn của chúng:

(a) Bán kính Bohr (cm).

(b) Năng lượng liên kết của hydro (eV).

(c) Magneton Bohr (tự chọn đơn vị).

(d) Bước sóng Compton của một electron (cm).

(e) Bán kính cổ điển của electron (cm).

(f) Năng lượng nghỉ của electron (MeV).

(g) Năng lượng nghỉ của proton (MeV).

(h) Hằng số cấu trúc tinh tế.

(i) Sự tách mức cấu trúc tinh tế điển hình trong nguyên tử hydro (eV).

(Berkeley)

Lời giải:

(a) $a = \hbar^2/me^2 = 5,29 \times 10^{-9}$ cm.

(b) $E = me^4/2\hbar^2 = 13,6$ eV.

(c) $\mu_B = e\hbar/2mc = 9,27 \times 10^{-21}$ erg $\cdot$ Gs^{-1}.

(d) $\lambda = 2\pi\hbar/mc = 2,43 \times 10^{-10}$ cm.

(e) $r_e = e^2/mc^2 = 2,82 \times 10^{-13}$ cm.

(f) $E_e = mc^2 = 0,511$ MeV.

(g) $E_p = Mc^2 = 938$ MeV.

(h) $\alpha = e^2/\hbar c = 7,30 \times 10^{-3} \approx 1/137$.

(i) $\Delta E = e^8mc^2/8\hbar^2c^4 = \frac{1}{8}\alpha^4mc^2 = 1,8 \times 10^{-4}$ eV.

1003

Hãy rút ra, đánh giá, dự đoán hoặc nhớ lại trị số của các đại lượng sau đây trong gần đúng một bậc độ lớn:

(a) Bước sóng Compton của electron.

(b) Tiết diện ngang Thomson của electron.

(c) Bán kính Bohr của hydro.

(d) Thế ion hóa của nguyên tử hydro.

(e) Sự tách siêu tinh tế của mức năng lượng cơ bản trong nguyên tử hydro.

(f) Mômen lưỡng cực từ của hạt nhân ${}_3\text{Li}^7$ $(Z = 3)$.

(g) Sự chênh lệch khối lượng giữa proton và nơtron.

(h) Thời gian sống của nơtron tự do.

(i) Năng lượng liên kết của hạt nhân Heli 4.

(j) Bán kính của hạt nhân bền lớn nhất.

(k) Thời gian sống của meson π^0.

(l) Thời gian sống của meson μ^-.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) $\lambda_e = h/m_ec = 2,43 \times 10^{-2}$ Å.

(b) $\sigma = \frac{8\pi}{3}r_e^2 = 6,56 \times 10^{-31}$ m^2.

(c) $a = \frac{\hbar^2}{m_ee^2} = 0,53$ Å.

(d) $I = \frac{e^2}{2a} = 13,6$ eV.

(e) Sự tách của mức năng lượng cơ bản là

$$\Delta E_f = 13,6 \times \left(\frac{1}{137}\right)^2 \approx 10^{-4} \text{ eV}.$$

Sự tách siêu tinh tế của mức năng lượng cơ bản là

$$\Delta E_{hf} \approx \Delta E_f/10^3 \approx 10^{-7} \text{ eV}.$$

(f) $\mu = 1,67 \times 10^{-26}\ J \cdot T^{-1}$.

(g) $\Delta m = m_p - m_n = -2,3 \times 10^{-30}$ kg.

(h) $\tau_n \approx 15$ phút $= 9 \times 10^2$ s.

(i) $E = 4 \times 7$ MeV $= 28$ MeV.

(j) Bán kính r tương ứng với vùng không gian trong đó lực hạt nhân có hiệu lực. Như vậy

$$r \approx 1,4\, A^{\frac{1}{3}} = 1,4 \times (100)^{\frac{1}{3}} = 6,5 \text{ fm}\,.$$

(k) $\tau = 8,28 \times 10^{-17}$ s.

(l) Sự phân rã của μ^- gây bởi tương tác yếu và do đó $\tau = 2,2 \times 10^{-6}$ s.

1004

Giải thích điều rút ra được về sự lượng tử hóa của bức xạ hoặc của hệ cơ học từ hai trong số các thí nghiệm sau:

(a) Hiệu ứng quang điện.

(b) Phổ bức xạ vật đen.

(c) Thí nghiệm Franck-Hertz.

(d) Thí nghiệm Davisson-Germer.

(e) Tán xạ Compton.

Mô tả chi tiết các thí nghiệm được lựa chọn, chỉ ra các hiệu ứng đo được nào là phi cổ điển và tại sao, giải thích chúng được hiểu theo quan điểm lượng tử như thế nào. Đưa ra các phương trình khi cần thiết.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) **Hiệu ứng quang điện**

Hiệu ứng này liên quan đến sự phát ra các electron quan sát được khi chiếu xạ một kim loại trong môi trường chân không bằng tia cực tím. Người ta thấy rằng cường độ của dòng điện được tạo ra theo cách đó tỉ lệ thuận với cường độ bức xạ chiếu tới khi tần số của ánh sáng lớn hơn một giá trị cực tiểu đặc trưng của kim loại, trong khi đó vận tốc của các electron không phụ thuộc vào cường độ sáng nhưng lại phụ thuộc vào tần số ánh sáng. Các kết quả này không thể giải thích được bằng vật lý cổ điển. Năm 1905 Einstein đã giải thích các kết quả này bằng cách giả thiết rằng ánh sáng khi tương tác với vật chất là tập hợp của các hạt có năng lượng $h\nu$ được gọi là các photon. Khi một photon

gặp một electron của kim loại nó sẽ bị hấp thụ hoàn toàn, và electron, sau khi nhận năng lượng $h\nu$, sẽ tiêu tốn một công W bằng năng lượng liên kết của nó trong kim loại, và bứt ra khỏi kim loại với động năng

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W\,.$$

Lý thuyết định lượng này về tính chất quang điện đã được chứng minh đầy đủ bằng thực nghiệm, như vậy thiết lập nên bản chất hạt của ánh sáng.

(b) **Bức xạ của vật đen**

Một vật đen là một vật hấp thụ tất cả các bức xạ đi tới nó. Phân bố phổ của bức xạ phát ra từ một vật đen có thể suy ra được từ các định luật tổng quát của tương tác giữa vật chất và bức xạ. Các biểu thức suy ra từ lý thuyết cổ điển được biết đến là định luật Wien và định luật Rayleigh. Định luật Wien chỉ phù hợp với thực nghiệm ở khoảng bước sóng ngắn trong khi định luật Rayleigh phù hợp với các kết quả ở các bước sóng dài và phân kì trong toàn phổ năng lượng.

Năm 1920, Planck đã thành công trong việc phá bỏ các khó khăn gặp phải trong vật lý cổ điển về bức xạ của vật đen bằng cách thừa nhận rằng sự trao đổi năng lượng giữa vật chất và bức xạ không xảy ra theo cách liên tục mà theo các lượng gián đoạn, không phân chia được hay các lượng tử. Ông ta đã chỉ ra rằng bằng cách giả thiết lượng tử năng lượng tỉ lệ với tần số, $\varepsilon = h\nu$, có thể thu được một biểu thức cho phổ hoàn toàn phù hợp với thực nghiệm

$$E_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\,\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}\,,$$

ở đây h là một hằng số phổ biến, ngày nay được gọi là hằng số Planck.

Giả thuyết Planck đã được khẳng định bằng hàng loạt các quá trình cơ bản và nó thể hiện trực tiếp sự tồn tại của tính gián đoạn trong các quá trình vật lý ở thang vi mô, đó là các hiện tượng lượng tử.

(c) **Thí nghiệm Franck–Hertz**

Thí nghiệm của Franck và Hertz là sự bắn phá các nguyên tử bằng các electron có cùng năng lượng và đo động năng của các electron tán xạ, từ đó bằng cách trừ hai năng lượng suy ra được lượng năng lượng hấp thụ trong quá trình va chạm với các nguyên tử. Giả thiết $E_0, E_1, E_2, \ldots$ là một dãy các mức năng lượng lượng tử hóa của các nguyên tử và T là động năng của các electron tới. Chừng nào T nhỏ hơn $\Delta = E_1 - E_0$, thì các nguyên tử không thể

hấp thụ năng lượng và tất cả các va chạm đều là đàn hồi. Khi $T > E_1 - E_0$, va chạm không đàn hồi sẽ xảy ra và một số nguyên tử sẽ nhảy lên trạng thái kích thích thứ nhất. Tương tự, các nguyên tử có thể bị kích thích lên trạng thái kích thích thứ hai khi $T > E_2 - E_0$. Điều này được tìm thấy chính xác từ thực nghiệm. Như vậy, thí nghiệm Franck - Hertz đã thiết lập được sự lượng tử hóa của các mức năng lượng nguyên tử.

(d) **Thí nghiệm Davisson—Germer**

L. de Broglie mong muốn xây dựng nên một cơ sở cho lý thuyết thống nhất giữa vật chất và bức xạ, đã thừa nhận rằng vật chất cũng như ánh sáng đều thể hiện cả hai tính chất sóng và hạt. Các thí nghiệm nhiễu xạ đầu tiên về sóng vật chất được thực hiện với các electron bởi Davisson và Germer (1927). Chùm tia tới được dùng là các electron được gia tốc qua một điện thế. Khi đã biết các tham số của mạng tinh thể thì ta có thể xác định được giá trị thực nghiệm của bước sóng của electron và các kết quả này phù hợp hoàn hảo với hệ thức de Broglie $\lambda = h/p$, ở đây h là hằng số Planck và p là xung lượng của các electron. Các thí nghiệm tương tự sau này được tiến hành bởi các nhà khoa học khác với chùm nguyên tử hêli và chùm phân tử hydro cho thấy cấu trúc kiểu sóng không chỉ là tính chất riêng của chùm electron.

(e) **Tán xạ Compton**

Compton đã quan sát sự tán xạ của các tia X bởi các electron tự do (hoặc liên kết yếu) và thấy rằng bước sóng của bức xạ tán xạ lớn hơn bước sóng của bức xạ tới. Sự chênh lệch $\Delta\lambda$ biến thiên như một hàm của góc θ giữa các phương của tia tới và tia tán xạ

$$\Delta\lambda = 2\,\frac{h}{mc}\,\sin^2\frac{\theta}{2},$$

ở đây h là hằng số Planck và m là khối lượng nghỉ của electron. Hơn nữa, $\Delta\lambda$ không phụ thuộc vào bước sóng tới. Hiệu ứng Conmpton không thể giải thích được bởi bất kì lý thuyết sóng cổ điển nào về ánh sáng và do đó khẳng định lý thuyết về photon ánh sáng.

1005

Trước khi Cơ học Lượng tử ra đời, một vấn đề lớn của lý thuyết là làm "dừng" sự phát xạ của nguyên tử. Hãy giải thích điều này. Sau khi ra đời môn Cơ học Lượng tử, một vấn đề lớn của lý thuyết là làm cho các nguyên tử ở các

trạng thái kích thích phát sáng. Hãy giải thích. Điều gì khiến cho các nguyên tử bị kích thích phát sáng?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Trước khi có Cơ học Lượng tử, theo mô hình nguyên tử của Rutherford các electron chuyển động quanh hạt nhân theo các quỹ đạo elip. Điện động lực học cổ điển đòi hỏi một hạt tích điện chuyển động có gia tốc phải phát ra bức xạ. Như vậy, nguyên tử phải phát ra ánh sáng. Điều này có nghĩa là các electron sẽ liên tục mất đi năng lượng và cuối cùng sẽ bị hút vào hạt nhân. Thực tế, các electron không bị hút vào hạt nhân và các nguyên tử vẫn ở trạng thái bền vững và không phát sáng. Vấn đề là làm thế nào phát minh ra một cơ chế để có thể ngăn chặn nguyên tử đó khỏi phát sáng. Tất cả các cố gắng đều không đi đến thành công.

Một nguyên lý cơ bản của Cơ học Lượng tử là khi không có tương tác bên ngoài thì Hamintonian của một nguyên tử không phụ thuộc vào thời gian. Điều này có nghĩa là một nguyên tử ở một trạng thái kích thích (vẫn là trạng thái dừng) sẽ giữ nguyên trạng thái và không tự phát sáng. Tuy nhiên, trên thực tế sự dịch chuyển tự phát của các nguyên tử bị kích thích vẫn xảy ra và ánh sáng cũng được phát ra.

Theo Điện động lực học Lượng tử, tương tác của trường bức xạ và các electron trong một nguyên tử, có chứa một số hạng của toán tử sinh đơn photon a^+, số hạng này không bị triệt tiêu ngay cả khi không có photon ban đầu. Đó là số hạng khiến cho các nguyên tử bị kích thích phát ra ánh sáng dẫn tới sự dịch chuyển tự phát.

1006

Xét một thí nghiệm trong đó một chùm electron được hướng tới một mặt phẳng chứa hai khe được đặt tên là A và B. Sau mặt phẳng này người ta đặt một màn chắn có một mảng các detector cho phép xác định electron đi tới vị trí nào trên màn chắn. Với mỗi một trường hợp dưới đây vẽ phác đồ thị biểu thị số electron tới tương đối theo hàm của vị trí trên màn chắn và giải thích ngắn gọn:

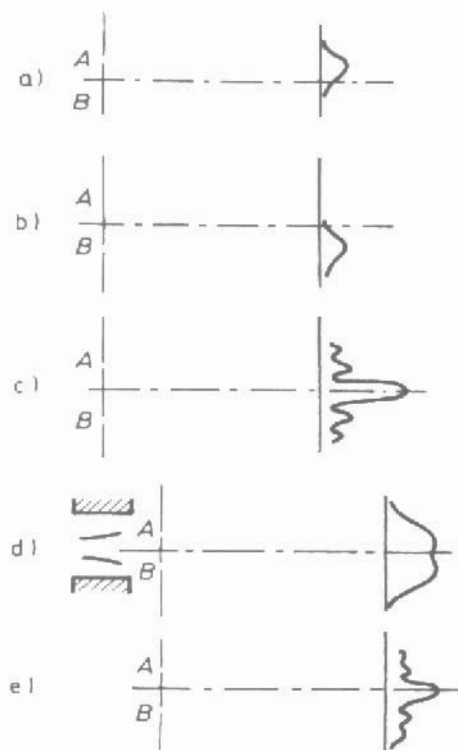
(a) Khe A mở, khe B đóng.

(b) Khe B mở, khe A đóng.

(c) Cả hai khe đều mở.

(d) Thiết bị "Stern-Gerlach" thiết kế các khe sao cho chỉ có các electron với $s_z = \hbar/2$ có thể đi qua khe A và chỉ có các electron với $s_z = -\hbar/2$ có thể đi qua khe B.

(e) Chỉ có các electron với $s_z = \hbar/2$ có thể qua khe A và chỉ có các electron với $s_z = \hbar/2$ có thể qua khe B.



Hình 1.1

Hiệu ứng sẽ như thế nào nếu chùm electron có cường độ rất yếu đến mức ở bất kì thời điểm nào cũng chỉ có một electron có thể đi qua hệ?

(Columbia)

Lời giải:

(a) Xác suất tìm thấy tại màn chắn là xác suất của các electron đi qua khe A

$$I_1 = I_A(x).$$

(b) Xác suất tìm thấy tại màn chắn là xác suất của các electron đi qua khe B

$$I_2 = I_B(x).$$

(c) $I_c = I_{12}(x) = I_1 + I_2 +$ số hạng giao thoa $\neq I_1 + I_2$.

(d) Trạng thái riêng của các electron đi qua khe A khác với trạng thái riêng của các electron đi qua khe B, và như vậy không có số hạng giao thoa. Cường độ trên màn chắn chỉ là tổng của cường độ sáng của các khe riêng rẽ

$$I_d = I_1 + I_2.$$

(e) Tương tự như (c), nhưng cường độ bằng một nửa cường độ sáng trong trường hợp (c)

$$I_e = I_c/2.$$

Do hiện tượng tự nhiễu xạ của các hàm sóng của các electron, các câu trả lời ở trên vẫn giữ nguyên giá trị thậm chí ngay cả khi cường độ chùm tia electron tới rất thấp sao cho chỉ có một electron đi qua tại một thời điểm.

1007

Một hạt có khối lượng m chịu một lực tác dụng $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$ sao cho hàm sóng $\varphi(\mathbf{p}, t)$ thỏa mãn phương trình Schrödinger trong không gian xung lượng

$$(\mathbf{p}^2/2m - a\nabla_p^2)\,\varphi(\mathbf{p}, t) = i\partial\varphi(\mathbf{p}, t)/\partial t,$$

ở đây lấy $\hbar = 1$, a là một hằng số thực và

$$\nabla_p^2 = \partial^2/\partial p_x^2 + \partial^2/\partial p_y^2 + \partial^2/\partial p_z^2.$$

Hãy tìm lực $\mathbf{F}(\mathbf{r})$.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Các biểu diễn tọa độ và xung lượng của hàm sóng được liên hệ bởi các công thức

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int \varphi(\mathbf{k}, t)\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, d\mathbf{k},$$

$$\varphi(\mathbf{k}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int \psi(\mathbf{r}, t)\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, d\mathbf{r},$$

ở đây $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$. Như vậy (với $\hbar = 1$)

$$\mathbf{p}^2 \varphi(\mathbf{p}, t) \to -\nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t),$$
$$\nabla_{\mathbf{p}}^2 \varphi(\mathbf{p}, t) \to -r^2 \psi(\mathbf{r}, t),$$

và phương trình Schrödinger trong không gian tọa độ trở thành

$$\left(\frac{-\nabla^2}{2m} + ar^2\right) \varphi(\mathbf{r}, t) = i \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}.$$

Như vậy, thế năng sẽ bằng

$$V(\mathbf{r}) = ar^2,$$

và lực là

$$F(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r}) = -\frac{\mathbf{r}}{r} \frac{d}{dr} V(r) = -2a\mathbf{r}.$$

1008

Xét phương trình Schrödinger một chiều không phụ thuộc thời gian có thế năng bất kì $V(x)$. Hãy chứng minh rằng nếu một nghiệm $\psi(x)$ có tính chất $\psi(x) \to 0$ khi $x \to \pm\infty$, thì nghiệm này phải là nghiệm không suy biến và do đó là thực, có thể sai khác một thừa số pha.

Gợi ý: Hãy chứng minh bằng phản chứng.

(*Berkeley*)

Lời giải:

Giả thiết rằng tồn tại một hàm khác $\phi(x)$ cũng thỏa mãn phương trình Schrödinger đó với cùng năng lượng E như đối với hàm sóng ψ và thỏa mãn điều kiện $\lim_{x\to\infty} \phi(x) = 0$. Khi đó

$$\psi''/\psi = -2m(E - V)/\hbar^2,$$
$$\phi''/\phi = -2m(E - V)/\hbar^2,$$

suy ra

$$\psi''\phi - \phi''\psi = 0,$$

hay

$$\psi'\phi - \phi'\psi = \text{hằng số}.$$

Các điều kiện biên tại $x \to \infty$ dẫn đến

$$\psi'\phi - \phi'\psi = 0\,,$$

hay

$$\frac{\psi'}{\psi} = \frac{\phi'}{\phi}\,.$$

Tích phân hai vế ta có ln ψ =ln ϕ + hằng số, hoặc ψ = hằng số × ϕ. Do đó, ψ và ϕ mô tả cùng một trạng thái theo cách giải thích thống kê của hàm sóng. Tức là nghiệm là không suy biến.

Khi $V(x)$ là hàm thực thì, ψ^* và ψ thỏa mãn cùng một phương trình với cùng một năng lượng và cùng điều kiện biên $\lim_{x\to\infty} \psi^* = 0$. Như vậy $\psi^* = c\psi$, hoặc $\psi = c^*\psi^*$, từ đó ta có $|c|^2 = 1$, hoặc $c = \exp(i\delta)$, ở đây δ là một số thực. Nếu ta chọn $\delta = 0$, thì $c = 1$ và ψ là hàm thực.

1009

Xét một hạt liên kết một chiều.

(a) Hãy chứng minh rằng

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\,\psi(x,t)\,dx = 0\,.$$

(ψ không nhất thiết là một trạng thái dừng).

(b) Chứng minh rằng, nếu hạt ở trạng thái dừng tại một thời điểm cho trước thì nó sẽ luôn ở trạng thái dừng.

(c) Nếu tại $t = 0$ hàm sóng là không đổi trong khoảng $-a < x < a$ và bằng không ở những nơi khác, hãy mô tả hàm sóng đầy đủ tại một thời điểm sau đó dưới dạng các trạng thái riêng của hệ.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Xét phương trình Schrödinger và liên hợp phức của nó

$$i\hbar\,\partial\psi/\partial t = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi\,, \tag{1}$$

$$-i\hbar\,\partial\psi^*/\partial t = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^*\,. \tag{2}$$

Lấy $\psi^* \times (1) - \psi \times (2)$ ta được

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) .$$

Đối với trường hợp một chiều ta có, khi lấy tích phân trên toàn không gian

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (x, t) \psi (x, t) dx = \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx$$
$$= \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \partial\psi/\partial x - \psi \partial\psi^*/\partial x]_{-\infty}^{\infty} .$$

Nếu ψ là một trạng thái liên kết thì $\psi(x \to \pm\infty) = 0$ và như vậy

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (x, t) \psi (x, t) dx = 0 .$$

(b) Giả thiết hạt ở trạng thái dừng với năng lượng E tại $t = t_0$, ta có

$$\hat{H}\psi(x, t_0) = E\psi(x, t_0) ,$$

ở đây $\hat{H}$ không phụ thuộc tường minh vào thời gian. Tại bất kì thời điểm t nào sau đó, có thể áp dụng phương trình Schrödinger

$$i\hbar\partial\psi(x, t)/\partial t = \hat{H}\psi(x, t)$$

Vì $\hat{H}$ không phụ thuộc tường minh vào t nên phương trình Schrödinger có nghiệm hình thức là

$$\psi(x, t) = \exp[-i\hat{H}(t - t_0)/\hbar]\, \psi(x, t_0) .$$

Tác dụng $\hat{H}$ lên hai vế và chú ý tính giao hoán giữa $\hat{H}$ và $\exp[-i(t - t_0)\hat{H}/\hbar]$, ta được

$$\hat{H}\psi(x, t) = \exp\left[\frac{-i\hat{H}(t - t_0)}{\hbar}\right] \hat{H}\psi(x, t_0)$$
$$= \mathbf{E} \exp\left[\frac{-i\hat{H}(t - t_0)}{\hbar}\right] \psi(x, t_0)$$
$$= \mathbf{E}\psi(x, t) .$$

Như vậy, $\psi(x, t)$ biểu diễn trạng thái dừng ban đầu tại mọi thời điểm t.

(c) Hàm sóng tại thời điểm $t = 0$ có thể được viết như sau

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} C, & |x| < a, \\ 0, & \text{các giá trị } x \text{ còn lại}, \end{cases}$$

ở đây C là một hằng số. Điều kiện chuẩn hóa $\int_{-a}^{a} \psi^* \psi \, dx = 1$ dẫn tới $C = (\frac{1}{2a})^{\frac{1}{2}}$.

Giả thiết hàm riêng của trạng thái liên kết là $\langle x \mid n \rangle$ và $\hat{H} \mid n \rangle = E_n \mid n \rangle$. Khi đó:

$$1 = \sum_n |n\rangle\langle n|,$$

và

$$|\psi(x, 0)\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi(x, 0)\rangle,$$

$$|\psi(x, t)\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi(x, 0)\rangle \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right).$$

Như vậy

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n \psi_n(x) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right),$$

với

$$a_n = \langle n|\psi(x, 0)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi(x, 0) \, dx$$

$$= \sqrt{\frac{1}{2a}} \int_{-a}^{a} \psi_n^*(x) \, dx.$$

1010

$\psi(x, t)$ là một nghiệm của phương trình Schrödinger đối với một hạt tự do có khối lượng m trong không gian một chiều, và

$$\psi(x, 0) = A \exp(-x^2/a^2).$$

(a) Tại thời điểm $t = 0$ hãy tìm biên độ xác suất trong không gian xung lượng.

(b) Tìm $\psi(x, t)$.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Tại thời điểm $t = 0$ biên độ xác suất trong không gian xung lượng là

$$\begin{aligned}\psi(p, 0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar}\, \psi(x, 0)\, dx \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-x^2/a^2 - ipx/\hbar\right) dx \\ &= \frac{Aa}{\sqrt{2\hbar}} \exp\left(-a^2p^2/4\hbar^2\right).\end{aligned}$$

(b) Phương trình Schrödinger trong không gian xung lượng đối với một hạt tự do

$$i\hbar\partial\psi(p, t)/\partial t = \hat{H}\psi(p, t) = \frac{p^2}{2m}\, \psi(p, t),$$

dẫn đến

$$\psi(p, t) = B\, \exp\left(\frac{-ip^2t}{2m\hbar}\right)$$

Tại thời điểm $t = 0$, ta có $B = \psi(p, 0)$. Do đó

$$\psi(p, t) = \frac{Aa}{\sqrt{2\hbar}} \exp\left[-\frac{a^2p^2}{4\hbar^2} - \frac{ip^2t}{2m\hbar}\right],$$

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{ipx}{\hbar}\right] \psi(p, t)\, dp \\ &= \frac{Aa}{\sqrt{a^2 + \dfrac{2i\hbar t}{m}}} \exp\left[-\frac{x^2}{\left(a^2 + \dfrac{2i\hbar t}{m}\right)}\right].\end{aligned}$$

Ta cũng có thể khai triển hàm sóng trên thành tổ hợp của các sóng phẳng

và thu được

$$\psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p,0)\, e^{i(kx-\omega t)}\, dp$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Aa}{\sqrt{2\hbar}} \exp\left[-\frac{a^2p^2}{4\hbar^2}\right] \times \exp\left[i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{p^2t}{2m\hbar}\right)\right] dp$$

$$= \frac{Aa}{2\hbar\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{a^2p^2}{4\hbar^2} - \frac{ip^2t}{2m\hbar} + \frac{ipx}{\hbar}\right] dp$$

$$= \frac{Aa}{\sqrt{a^2 + \frac{2i\hbar t}{m}}} \exp\left[-\frac{x^2}{\left(a^2 + \frac{2i\hbar t}{m}\right)}\right],$$

hoàn toàn phù hợp với kết quả trước.

1011

Một hạt có khối lượng m bị giới hạn trong một vùng một chiều $0 \leq x \leq a$ như chỉ ra trên Hình 1.2. Tại $t = 0$ hàm sóng chuẩn hóa của nó là

$$\psi(x, t=0) = \sqrt{8/5a}\left[1 + \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right] \sin(\pi x/a).$$

(a) Hãy xác định dạng hàm sóng tại thời điểm $t = t_0$ sau đó.

(b) Tính năng lượng trung bình của hệ tại $t = 0$ và tại $t = t_0$.

(c) Tìm xác suất để tìm thấy hạt ở nửa bên trái của hộp (tức là trong vùng $0 \leq x \leq a/2$) tại $t = t_0$.

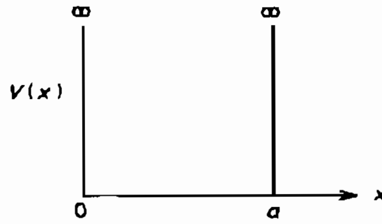
(*MIT*)

Lời giải:

Phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian đối với vùng $0 < x < a$ là

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + E\psi = 0.$$

Nó có nghiệm $\psi(x) = A\sin kx$, ở đây k được xác định bởi $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, thỏa mãn điều kiện $\psi(0) = 0$. Điều kiện biên $\psi(a) = 0$ yêu cầu $ka = n\pi$. Như vậy, các hàm riêng chuẩn hóa là



Hình 1.2

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right),$$

và các trị riêng năng lượng là

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots .$$

Bất kì một hàm sóng $\psi(x, t)$ nào cũng có thể được khai triển theo ψ_n

$$\psi(x, t) = \sum_n A_n(t)\psi_n(x, 0)$$

với

$$A_n(t) = A_n(0)\exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right).$$

Do

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{8}{5a}}\left(1 + \cos\frac{\pi x}{a}\right)\sin\frac{\pi x}{a}$$
$$= \sqrt{\frac{8}{5a}}\,\sin\frac{\pi x}{a} + \sqrt{\frac{2}{5a}}\,\sin\frac{2\pi x}{a},$$

ta có

$$A_1(0) = \frac{2}{\sqrt{5}}, \quad A_2(0) = \frac{1}{\sqrt{5}}, \quad A_n(0) = 0 \quad \text{với } n \neq 1, 2.$$

(a) Như vậy

$$\psi(x, t_0) = \sqrt{\frac{8}{5a}} \exp\left(-\frac{i\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right) \sin\frac{\pi x}{a} + \sqrt{\frac{2}{5a}} \exp\left(-\frac{i2\pi^2\hbar t_0}{ma^2}\right) \sin\frac{2\pi x}{a}$$

$$= \sqrt{\frac{8}{5a}} \left[\exp\left(\frac{-i\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right) + \exp\left(\frac{-i2\pi^2\hbar t_0}{ma^2}\right) \cos\frac{\pi x}{a}\right] \sin\frac{\pi x}{a}.$$

(b) Năng lượng trung bình của hệ là

$$\langle E\rangle = \sum_n \langle\psi_n|E|\psi_n\rangle = \sum_n A_n(0)^2 E_n$$

$$= \frac{4}{5} E_1 + \frac{1}{5} E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{5ma^2}.$$

(c) Xác suất để tìm thấy hạt trong khoảng $0 \leq x \leq \frac{a}{2}$ tại $t = t_0$ là

$$P\left(0 \leq x \leq \frac{a}{2}\right) = \int_0^{a/2} |\psi(x, t_0)|^2 dx$$

$$= \frac{8}{5a} \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \left[1 + \cos^2\frac{\pi x}{a} + 2\cos\frac{\pi x}{a} \cos\left(\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right)\right] dx$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{16}{15\pi} \cos\left(\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right).$$

1012

Một hạt khối lượng m chuyển động trong một hộp một chiều có chiều dài l với thế năng

$$V = \infty, \quad x < 0,$$
$$V = 0, \quad 0 < x < l,$$
$$V = \infty, \quad x > l.$$

Tại một thời điểm nhất định, được gọi là $t = 0$, hàm sóng của hạt này được biết có dạng

$$\psi = \sqrt{30/l^5}\, x(l - x), \qquad 0 < x < l\,,$$
$$\psi = 0, \qquad \text{trong các khoảng còn lại.}$$

Hãy viết biểu thức cho $\psi(x, t > 0)$ ở dạng chuỗi, và các biểu thức xác định các hệ số của chuỗi đó.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Các hàm riêng và các trị riêng năng lượng tương ứng là

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\, \sin\left(\frac{\pi x}{l}\, n\right), \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{l}\, n\right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots .$$

Như vậy

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle\,,$$

ở đây

$$\begin{aligned}\langle n|\psi(t=0)\rangle &= \int_0^l \sqrt{\frac{2}{l}}\, \sin\left(\frac{\pi x}{l}\, n\right) \cdot \sqrt{\frac{30}{l^5}}\, x(l-x)\, dx \\ &= 4\sqrt{15}\left(\frac{1}{n\pi}\right)^3 (1 - \cos n\pi) \\ &= 4\sqrt{15}\,[1 - (-1)^n]\,(1/n\pi)^3\,,\end{aligned}$$

và do đó,

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \langle n|\psi(t=0)\rangle\, \psi_n(x)\, \exp\left(-i\,\frac{E_n}{\hbar}\, t\right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} 8\sqrt{\frac{30}{l}} \cdot \frac{1}{(2n+1)^3\pi^3}\, \sin\left(\frac{2n+1}{l}\,\pi x\right)\, e^{-i\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{2n+1}{l}\pi\right)^2 t}\,.\end{aligned}$$

1013

Một quay tử rắn với mômen quán tính I_z tự do trong mặt phẳng $x - y$. Đặt ϕ là góc giữa trục x và trục của quay tử.

(a) Tìm các trị riêng năng lượng và các hàm riêng tương ứng.

(b) Tại thời điểm $t = 0$ quay tử được mô tả bằng một bó sóng $\psi(0) = A \sin^2 \phi$. Hãy tìm $\psi(t)$ với $t > 0$.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Hamiltonian của một quay tử trong mặt phẳng có dạng

$$H = -(\hbar^2/2I_z)\, d^2/d\phi^2$$

và như vậy phương trình Schrödinger là

$$-(\hbar^2/2I_z)\, d^2\psi/d\phi^2 = E\psi\,.$$

Đặt $\alpha^2 = 2I_zE/\hbar^2$, ta viết nghiệm dưới dạng

$$\psi = A\, e^{i\alpha\phi} + B\, e^{-i\alpha\phi}\,,$$

ở đây A, B là các hằng số bất kì. Để hàm sóng đơn trị, tức là $\psi(\phi) = \psi(\phi+2\pi)$, ta cần

$$\alpha \equiv m = 0, \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots\,.$$

Vậy, các trị riêng năng lượng là

$$E_m = m^2\hbar^2/2I_z\,, \quad m = 0,\ \pm 1,\ \ldots\,.$$

và các hàm riêng tương ứng là

$$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\phi}\,, \quad m = 0,\ \pm 1,\ \ldots\,,$$

sau khi thực hiện việc chuẩn hóa $\int_0^{2\pi} \psi_m^* \psi_m d\phi = 1$.

(b) Tại thời điểm $t = 0$

$$\psi(0) = A\, \sin^2 \phi = \frac{A}{2}\,(1 - \cos 2\phi)$$
$$= A/2 - \frac{A}{4}\,(e^{i2\phi} + e^{-i2\phi})\,,$$

tương ứng với $m = 0$ và $m = \pm 2$. Vận tốc góc được tính bởi $E_m = \frac{1}{2} I_z\dot{\phi}^2$, hay $\dot{\phi} = \frac{m\hbar}{I_z}$. Như vậy, ta có tại thời điểm t

$$\psi(t) = \frac{A}{2} - \frac{A}{4}\left[e^{i2(\phi-\hbar t/I_z)} + e^{-i2(\phi+\hbar t/I_z)}\right].$$

1014

Một electron bị giam ở trạng thái cơ bản trong hộp một chiều có bề rộng 10^{-10} m. Năng lượng của nó là 38 eV. Hãy tính:

(a) Năng lượng của electron ở trạng thái kích thích thấp nhất.

(b) Lực trung bình tác dụng lên các thành hộp khi electron ở trạng thái cơ bản.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Một electron bị giam trong một hộp một chiều có thể có các mức năng lượng (**Bài tập 1011**)

$$E_n = \hbar^2\pi^2 n^2/2ma^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots .$$

Như vậy, đối với trạng thái kích thích thấp nhất ($n = 2$), năng lượng của nó là $E_2 = 4E_1 = 152$ eV.

(b) Lực trung bình tác dụng lên thành hộp là

$$F = -\langle \partial \hat{H}/\partial a\rangle .$$

Lấy vi phân phương trình của trạng thái dừng $(\hat{H} - E_n)\psi_n = 0$, ta được

$$\left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial a} - \frac{\partial E_n}{\partial a}\right)\psi_n + (\hat{H} - E_n)\frac{\partial \psi_n}{\partial a} = 0,$$

hay

$$\psi_n^*(\hat{H} - E_n)\frac{\partial \psi_n}{\partial a} = \psi_n^*\left(\frac{\partial E_n}{\partial a} - \frac{\partial \hat{H}}{\partial a}\right)\psi_n .$$

Tích phân vế trái của phương trình trên, ta có

$$\int \psi_n^*(\hat{H} - E_n)\frac{\partial \psi_n}{\partial a}\,dx = \int \frac{\partial \psi_n}{\partial a}(\hat{H} - E_n)^*\psi_n^*\,dx .$$

Tích phân này bằng không vì $\hat{H}$ là thực. Tích phân vế phải của phương trình này dẫn đến

$$\langle \partial \hat{H}/\partial a\rangle = \partial E_n/\partial a .$$

Như vậy

$$F = -\partial E_n/\partial a\,.$$

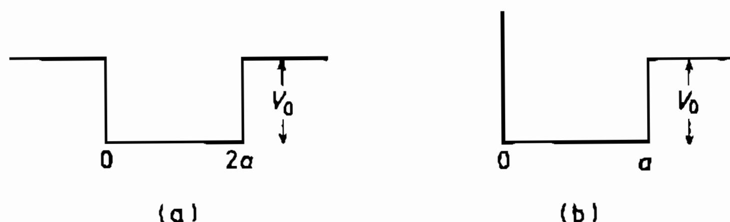
Đối với trạng thái cơ bản, $n = 1$ và

$$F = 2E_1/a = 7,6 \times 10^9 \text{ eV/cm} = 1,22 \times 10^{-2} \text{ dyne}\,.$$

1015

Hãy cho biết các mức năng lượng $E_n^{(a)}$ của thế năng một chiều ở Hình 1.3(a) cũng như các mức năng lượng $E_n^{(b)}$ của thế năng ở Hình 1.3(b).

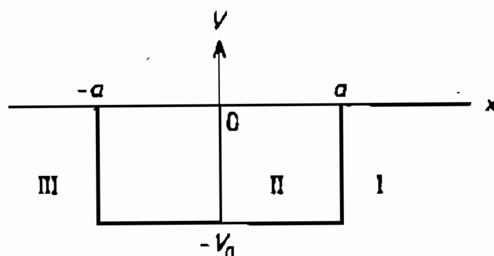
(*Wisconsin*)



Hình 1.3

Lời giải:

(a) Sử dụng hệ tọa độ như chỉ ra trên Hình 1.4, phương trình Schrödinger là



Hình 1.4

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi\,.$$

ở đây

$$V = 0 \quad \text{với } x > a \quad (\text{vùng I}),$$
$$V = -V_0 \quad \text{với } -a < x < a \quad (\text{vùng II}),$$
$$V = 0 \quad \text{với } x < -a \quad (\text{vùng III}).$$

Với trạng thái liên kết ta cần có $-V_0 < E < 0$. Đặt

$$k^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}, \quad k'^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}.$$

phương trình Schrödinger trở thành

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad \text{đối với vùng II},$$

và

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - k'^2\psi = 0 \quad \text{đối với vùng I và III},$$

chúng có các nghiệm

$$\psi = A \sin kx + B \cos kx \quad \text{đối với} - a < x < a,$$
$$\psi = Ce^{-k'x} + De^{k'x} \quad \text{đối với } x < -a \text{ và } x > a.$$

Điều kiện để $\psi \to 0$ khi $x \to \pm\infty$ đòi hỏi

$$\psi = Ce^{-k'x} \quad \text{đối với } x > a \ (\text{vùng I}),$$
$$\psi = De^{k'x} \quad \text{đối với } x < a \ (\text{vùng III}).$$

Các điều kiện biên để ψ và ψ' liên tục tại $x = \pm a$ dẫn tới

$$A \sin ka + B \cos ka = Ce^{-k'a},$$
$$-A \sin ka + B \cos ka = De^{-k'a},$$
$$Ak \cos ka - Bk \sin ka = -Ck' e^{-k'a},$$
$$Ak \cos ka + Bk \sin ka = Dk' e^{-k'a};$$

hay

$$2A \sin ka = (C - D)\, e^{-k'a},$$
$$2B \cos ka = (C + D)\, e^{-k'a},$$
$$2Ak \cos ka = -(C - D)\, k' e^{-k'a},$$
$$2Bk \sin ka = (C + D)k' e^{-k'a}.$$

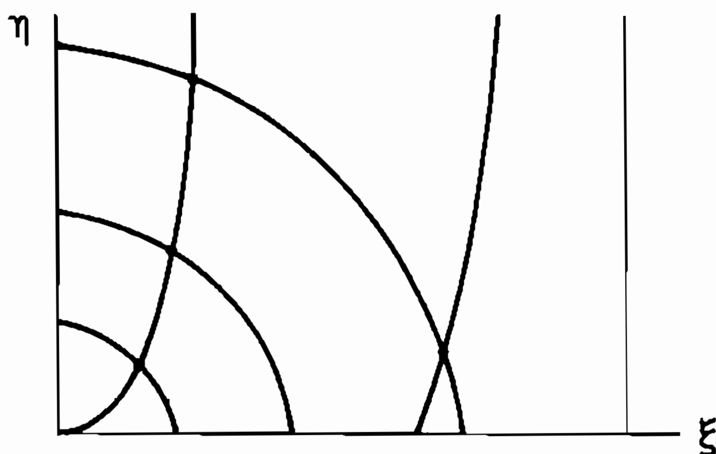
Để các nghiệm trong đó A, B, C, D không đồng thời bằng không, ta phải có hoặc là $A = 0$, $C = D$ dẫn tới $k \tan ka = k'$, hoặc là $B = 0$, $C = -D$ dẫn tới $k \cot ka = -k'$. Như vậy, hai loại nghiệm đều được phép, dẫn tới các trạng thái liên kết. Đặt $\xi = ka$, $\eta = k'a$.

Loại 1:

$$\begin{cases} \xi \tan \xi = \eta \,. \\ \xi^2 + \eta^2 = \gamma^2 \,, \end{cases}$$

ở đây $\gamma^2 = k^2a^2 + k'^2a^2 = \frac{2\,mV_0a^2}{\hbar^2}$.

Do ξ và η có các giá trị dương nên các mức năng lượng được xác định từ các giao điểm trong cung phần tư thứ nhất của đường tròn bán kính γ với đường cong $\xi \tan \xi$ vẽ theo ξ, như chỉ ra trên Hình 1.5. Số các mức gián đoạn phụ thuộc vào V_0 và a, hai tham số này xác định giá trị của γ. Với γ nhỏ chỉ có thể có một nghiệm.



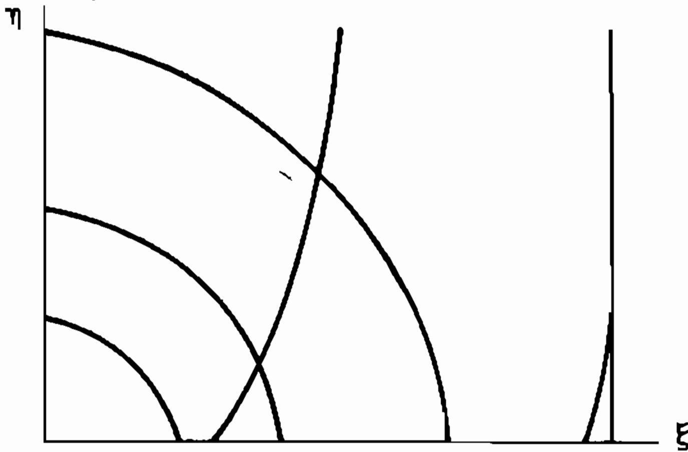
Hình 1.5

Loại 2:

$$\begin{cases} \xi \cot \xi = -\eta \,, \\ \xi^2 + \eta^2 = \gamma^2 \,. \end{cases}$$

Cách dựng tương tự như trên được mô tả trên Hình 1.6. Ở đây giá trị nhỏ nhất của V_0a^2 không cho nghiệm, còn hai giá trị lớn hơn mỗi giá trị tương ứng với một nghiệm.

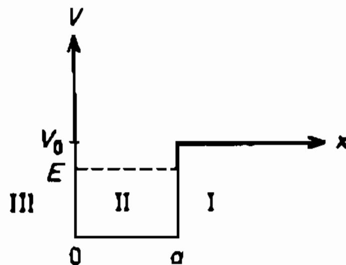
Chú ý rằng $\xi = 0, \eta = 0$ là một nghiệm của $\xi \tan \xi = \eta$ vì thế bất kể γ nhỏ



Hình 1.6

thế nào vẫn luôn có một nghiệm loại 1, trong khi đó γ phải lớn hơn một giá trị cực tiểu xác định bởi điều kiện ξ cot $\xi = 0$ mới tồn tại một nghiệm loại 2 tương ứng với $\xi = \frac{\pi}{2}$, tức là $\gamma = \frac{\pi}{2}$ hoặc $V_0 a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$.

(b) Sử dụng các tọa độ chỉ ra trên Hình 1.7.



Hình 1.7

phương trình Schrödinger có các nghiệm

$$\psi = A \sin kx + B \cos kx \quad \text{đối với } 0 < x < a\,,$$
$$\psi = Ce^{-k'x} \quad \text{đối với } x > a,$$
$$\psi = 0 \quad \text{đối với } x < 0\,,$$

thỏa mãn điều kiện $\psi \to 0$ khi $x \to \infty$. Các điều kiện biên tại $x = 0$ và $x = a$

dẫn đến $B = 0$,

$$A \sin ka = Ce^{-k'a},$$

$$Ak \cos ka = -Ck'e^{-k'a};$$

và cuối cùng

$$\xi \cot \xi = -\eta,$$
$$\xi^2 + \eta^2 = \gamma^2,$$

như đối với các nghiệm loại 2 đã nói ở trên.

1016

Xét bài toán một chiều của một hạt có khối lượng m trong hố thế (Hình 1.7)

$$V = \infty, \quad x < 0,$$
$$V = 0, \quad 0 \le x \le a,$$
$$V = V_0, \quad x > a.$$

(a) Hãy chỉ ra rằng các năng lượng liên kết ($E < V_0$) được xác định từ phương trình

$$\tan \frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar} = -\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}.$$

(b) Không cần giải thêm, hãy vẽ hàm sóng của trạng thái cơ bản.

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Các phương trình Schrödinger cho hai vùng là

$$\psi'' + 2mE\psi/\hbar^2 = 0, \qquad 0 \le x \le a,$$
$$\psi'' - 2m(V_0 - E)\psi/\hbar^2 = 0, \quad x > a,$$

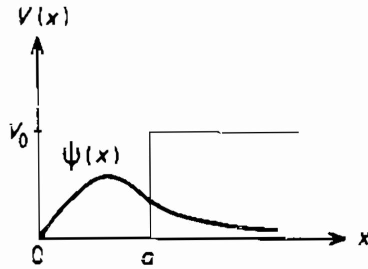
với các điều kiện biên tương ứng $\psi = 0$ với $x = 0$ và $\psi \to 0$ với $x \to +\infty$. Các nghiệm với $E < V_0$ là

$$\psi = \sin(\sqrt{2mE}x/\hbar), \qquad 0 \le x \le a;$$
$$\psi = Ae^{-\sqrt{2m(V_0-E)}\,x/\hbar}, \quad x > a,$$

ở đây A là một hằng số. Điều kiện để ψ và $\frac{d\psi}{dx}$ là liên tục tại $x = a$ dẫn đến

$$\tan\left(\sqrt{2mE}a/\hbar\right) = -[E/(V_0 - E)]^{1/2} .$$

(b) Hàm sóng trạng thái cơ bản được chỉ ra trên Hình 1.8.



Hình 1.8

1017

Động năng của một hạt chuyển động một chiều với thế năng $V(x)$ được xác định bởi Hamiltonian $H_0 = p^2/2m + V(x)$, ở đây $p = -i\hbar\, d/dx$ là toán tử xung lượng. Đặt $E_n^{(0)}$, $n = 1, 2, 3, \ldots$ là các trị riêng của H_0. Bây giờ, xét một Hamiltonian mới $H = H_0 + \lambda p/m$, ở đây λ là một tham số cho trước. Biết λ, m và $E_n^{(0)}$, hãy tìm các trị riêng của H.

(*Princeton*)

Lời giải:

Hamiltonian mới là

$$H = H_0 + \lambda p/m = p^2/2m + \lambda p/m + V(x)$$
$$= (p + \lambda)^2/2m + V(x) - \lambda^2/2m ,$$

hay

$$H' = \frac{p'^2}{2m} + V(x) ,$$

ở đây $H' = H + \frac{\lambda^2}{2m}$, $p' = p + \lambda$.

Các hàm riêng và các trị riêng của H' lần lượt là $E_n^{(0)}$ và $\psi_n^{(0)}$. Vì số sóng là $k' = \frac{p'}{\hbar} = \frac{1}{\hbar}(p + \lambda)$, nên các hàm riêng mới là

$$\psi = \psi^{(0)} e^{i\lambda x/\hbar}$$

và các trị riêng tương ứng là

$$E_n = E_n^{(0)} - \lambda^2/2m .$$

1018

Hãy xét hàm sóng một chiều

$$\psi(x) = A(x/x_0)^n \, e^{-x/x_0} ,$$

ở đây A, n và x_0 là những hằng số.

(a) Sử dụng phương trình Schrödinger, hãy tìm thế năng $V(x)$ và năng lượng E để hàm sóng này là một hàm riêng. (Giả thiết rằng khi $x \to \infty$, $V(x) \to 0$).

(b) Tìm mối liên hệ giữa thế năng này với thế xuyên tâm hiệu dụng của trạng thái hydro có mômen xung lượng quỹ đạo l.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Vi phân hàm sóng này, ta được

$$\frac{d}{dx}\psi(x) = A\frac{n}{x_0}\left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-1} e^{-x/x_0} + A\left(\frac{x}{x_0}\right)^n\left(-\frac{1}{x_0}\right)e^{-x/x_0} ,$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = A\frac{n(n-1)}{x_0^2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-2} e^{-x/x_0}$$

$$- 2A\frac{n}{x_0^2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-1} e^{-x/x_0} + A\frac{1}{x_0^2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^n e^{-x/x_0}$$

$$= \left[\frac{n(n-1)}{x^2} - 2\frac{n}{x_0 x} + \frac{1}{x_0^2}\right]\psi(x) .$$

Thay vào phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x) ,$$

ta có

$$E - V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{x_0 x} + \frac{1}{x_0^2}\right] .$$

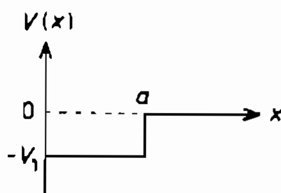
Do $V(x) \to 0$ khi $x \to \infty$, ta có $E = -\frac{\hbar^2}{2mx_0^2}$ và như vậy

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{x_0 x}\right].$$

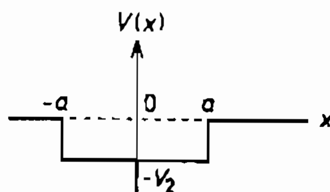
(b) Thế năng xuyên tâm hiệu dụng của nguyên tử hydro là $\frac{e^2}{r} - l(l+1)\frac{\hbar^2}{2mr^2}$. So sánh thế này với $V(x)$ ta thấy rằng số hạng $\frac{1}{r^2}$ về mặt hình thức tương đương với số hạng $\frac{1}{x^2}$ trong đó mômen xung lượng l được thay thế cho n. Số hạng $\frac{1}{x}$ của $V(x)$ phụ thuộc vào $n = l$, trong khi đó số hạng $\frac{1}{r}$ (thế Coulomb) trong biểu thức thế năng hiệu dụng của nguyên tử hydro không phụ thuộc vào mômen xung lượng quỹ đạo l. Đây là sự khác nhau giữa hai thế năng này.

1019

Xét các hố thế năng một chiều dưới đây:



Hình 1.9



Hình 1.10

(a) Các hố thế này với độ sâu V_i $(i = 1, 2)$ nhỏ tuỳ ý có thể cho phép một trạng thái liên kết hay không? Giải thích định tính.

(b) Với $V_1 = V_2$, năng lượng của các trạng thái liên kết của hai hố thế này liên hệ với nhau như thế nào?

(c) Đối với các trạng thái liên tục với năng lượng đã cho, mỗi một hố thế có thể có bao nhiêu nghiệm độc lập?

(d) Hãy giải thích một cách định tính làm thế nào để các trạng thái liên kết ứng với hạt có khả năng nằm bên ngoài hố nhiều hơn là nằm bên trong hố.

(Wisconsin)

Lời giải:

(a) Với các trạng thái liên kết ta phải có $-V < E < 0$. Đặt

$$k^2 = \frac{2m(E+V)}{\hbar^2}, \quad k'^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2},$$

ở đây $V = V_1, V_2$ ứng với hai trường hợp, và đặt $\xi = ka$, $\eta = k'a$, $\gamma = \frac{\sqrt{2mV}}{\hbar}a$. Theo lời giải của **Bài tập 1015** thì đối với thế năng trong Hình 1.9, các nghiệm được cho bởi

$$\xi \cot \xi = -\eta, \quad \xi^2 + \eta^2 = \gamma^2 .$$

Các mức năng lượng được xác định bởi giao điểm của đường cong $\xi \cot \xi = -\eta$ với đường tròn bán kính γ có tâm tại gốc (Hình 1.6) trong cung phần tư thứ nhất. Như hình vẽ cho thấy, γ phải lớn hơn giá trị ξ để sao cho $\xi \cot \xi = 0$, tức là, $\xi \geq \frac{\pi}{2}$. Như vậy, để tồn tại một trạng thái liên kết, ta cần có $\frac{a\sqrt{2mV_1}}{\hbar} \geq \frac{\pi}{2}$, hay $V_1 \geq \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$.

Đối với thế năng trong Hình 1.10, có hai loại nghiệm được phép. Một loại giống như các nghiệm trong trường hợp Hình 1.6 và không xảy ra với V_2 nhỏ bất kì. Loại nghiệm còn lại được cho bởi

$$\begin{cases} \xi \tan \xi = \eta, \\ \xi^2 + \eta^2 = \gamma^2 . \end{cases}$$

Do đường cong $\xi \tan \xi = \eta$ xuất phát từ gốc nên γ có thể nhỏ tuỳ ý mà giao điểm với đường cong vẫn tồn tại. Như vậy, với V_2 nhỏ bất kì, sẽ vẫn luôn tồn tại một trạng thái liên kết.

(b) Đối với $V_1 = V_2$, các trạng thái liên kết của thế năng ở Hình 1.9 cũng là các trạng thái liên kết của Hình 1.10.

(c) Đối với các trạng thái liên tục ứng với một năng lượng cho trước, chỉ có một nghiệm độc lập cho hố thế 1, đó là một nghiệm sóng dừng với $\psi = 0$ tại $x = 0$; có hai nghiệm độc lập tương ứng với các sóng chạy theo các hướng $+x$ và x cho hố thế 2.

(d) Đặt p_1, p_2 lần lượt kí hiệu cho các xác suất để hạt nằm bên trong và bên ngoài hố thế. Ví dụ ta xét nghiệm lẻ

$$\psi = A \sin kx \quad \text{với} \quad 0 < x < a\,,$$
$$\psi = Ce^{-k'x} \quad \text{với} \quad a < x\,,$$

ở đây $k = \frac{\sqrt{2m(V_i + E)}}{\hbar}$ $(i = 1, 2)$, $k' = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$, khi đó

$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{\int_0^a A^2 \sin^2 kx\, dx}{\int_a^\infty C^2 e^{-2k'x}\, dx} = \frac{A^2}{C^2}\frac{k'a}{e^{-2k'a}}\left(1 - \frac{\sin 2ka}{2ka}\right).$$

Tính liên tục của ψ tại $x = a$ dẫn tới

$$\frac{A}{C} = \frac{e^{-k'a}}{\sin ka}.$$

Cũng như trước, ta đặt, $\eta = k'a$, $\xi = ka$, ta có

$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{\eta}{\sin^2 \xi}\left(1 - \frac{\sin 2\xi}{2\xi}\right) = \frac{2\eta}{1 - \cos 2\xi}\left(1 - \frac{\sin 2\xi}{2\xi}\right).$$

Các nghiệm lẻ được cho bởi

$$\begin{cases} \xi \cot \xi = -\eta, \\ \xi^2 + \eta^2 = \gamma^2, \end{cases}$$

ở đây $\gamma^2 = \frac{2mV_i a^2}{\hbar^2}$ $(i = 1, 2)$.

Một nghiệm giải tích được phép nếu $\gamma \to (n + \frac{1}{2})\pi$, hay

$$V_i a^2 \to \frac{(n + \frac{1}{2})^2 \pi^2 \hbar^2}{2m}, \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

ứng với nghiệm là $\xi \to (n + \frac{1}{2})\pi$, $\eta \to 0$, và

$$\frac{p_1}{p_2} \to 0\,.$$

Hạt như vậy có khả năng ở bên ngoài hố thế hơn là ở bên trong hố.

1020

Hãy tìm năng lượng liên kết của một hạt khối lượng m chuyển động một chiều trong hố thế tầm ngắn sau

$$V(x) = -V_0\,\delta(x)\,.$$

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Phương trình Schrödinger

$$d^2\psi/dx^2 + \frac{2m}{\hbar^2}\,[E - V(x)]\,\psi = 0, \quad (E < 0)\,,$$

khi đặt

$$k = \sqrt{2m|\,E\,|}/\hbar, \quad U_0 = 2mV_0/\hbar^2\,,$$

có thể được viết lại thành

$$\psi''(x) - k^2\psi(x) + U_0\,\delta(x)\;\psi(x) = 0\,.$$

Tích phân hai vế phương trình trên theo x từ $-\varepsilon$ đến ε, ở đây ε là một số dương nhỏ bất kì, ta thu được

$$\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) - k^2\int_{\varepsilon}^{\varepsilon}\psi\,dx + U_0\psi(0) = 0\,,$$

khi cho $\varepsilon \to 0$, biểu thức trên trở thành

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) + U_0\psi(0) = 0\,. \qquad (1)$$

Tại $x \neq 0\;(\delta(x) = 0)$ phương trình Schrödinger có các nghiệm

$$\psi(x) \sim \exp(-kx) \quad \text{với } x > 0\,,$$
$$\psi(x) \sim \exp(kx) \quad \text{với } x < 0\,.$$

Từ (1) suy ra

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -2k\psi(0)\,.$$

So sánh giữa hai kết quả dẫn đến $k = U_0/2$. Như vậy, năng lượng liên kết là $-E = \hbar^2 k^2/2m = mV_0^2/2\hbar^2$.

1021

Xét một hạt khối lượng m với thế năng là hàm δ một chiều

$$V(x) = V_0\,\delta(x)\,.$$

Hãy chỉ ra rằng nếu V_0 có giá trị âm thì sẽ tồn tại một trạng thái liên kết, và năng lượng liên kết là $mV_0^2/2\hbar^2$.

(*Columbia*)

Lời giải:

Trong phương trình Schrödinger

$$d^2\psi/dx^2 + 2m[E - V(x)]\,\psi/\hbar^2 = 0\,,$$

nếu đặt $E < 0$ đối với trạng thái liên kết và đặt

$$k^2 = 2m\,|E|/\hbar^2, \quad U_0 = 2mV_0/\hbar^2\,,$$

ta thu được

$$d^2\psi/dx^2 - k^2\psi - U_0\,\delta(x)\psi = 0\,.$$

Tích phân hai vế theo x từ $-\varepsilon$ tới $+\varepsilon$, ở đây ε là một hằng số nhỏ tuỳ ý, ta có

$$\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) - k^2\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi\,dx - U_0\psi(0) = 0\,.$$

Với $\varepsilon \to 0^+$, biểu thức này trở thành $\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = U_0\,\psi(0)$. Đối với $x \neq 0$ phương trình Schrödinger có nghiệm hình thức $\psi(x) \sim \exp(-k\,|x|)$ với k dương, dẫn đến

$$\psi'(x) \sim -k\,\frac{|x|}{x}\,e^{-k|x|} = \begin{cases} -ke^{-kx}, & x > 0\,, \\ ke^{kx}, & x < 0\,, \end{cases}$$

và như vậy

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -2k\psi(0) = U_0\psi(0)\,.$$

Như vậy $k = -U_0/2$, cần có V_0 âm. Năng lượng của trạng thái liên kết là $E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -mV_0^2/2\hbar^2$ và năng lượng liên kết là $E_b = 0 - E = mV_0^2/2\hbar^2$. Hàm sóng của trạng thái liên kết này là

$$\psi(x) = A \exp\left(\frac{mV_0}{\hbar^2}\,|x|\right) = \sqrt{-mV_0/\hbar^2}\,\exp\left(mV_0\,|x|/\hbar^2\right),$$

ở đây hằng số bất kì A thu được từ điều kiện chuẩn hóa $\int_{-\infty}^{0} \psi^2\, dx + \int_0^{\infty} \psi^2\, dx = 1$.

1022

Một hạt khối lượng m chuyển động một chiều phi tương đối tính trong một hố thế năng có dạng $V(x) = -a\delta(x)$, ở đây $\delta(x)$ là hàm delta Dirac. Hạt ở trạng thái liên kết. Hãy tìm giá trị x_0 sao cho xác suất tìm thấy hạt trong vùng $|x| < x_0$ đúng bằng 1/2.

(*Columbia*)

Lời giải:

Đối với các trạng thái liên kết, $E < 0$, phương trình Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - a\delta(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

với $x \neq 0$ có nghiệm hữu hạn tại $x = \pm\infty$ như sau,

$$\psi(x) = \begin{cases} A\, e^{kx} & \text{với } x < 0, \\ A\, e^{-kx} & \text{với } x > 0\,, \end{cases}$$

ở đây $k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$ và A là một hằng số bất kì. Lấy tích phân hai vế vào phương trình Schrödinger từ $-\varepsilon$ đến $+\varepsilon$ rồi cho $\varepsilon \to 0$, ta được

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2ma}{\hbar^2}\psi(0) \tag{1}$$

bởi vì

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x)\,\delta(x)\,dx = \psi(0), \quad \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)\,dx = 0$$

và $\psi(0)$ xác định. Thay thế $\psi(x)$ vào (1), ta được

$$k = \frac{ma}{\hbar^2}\,.$$

Như vậy

$$\psi(x) = A \exp\left(-\frac{ma\,|\,x\,|}{\hbar^2}\right).$$

Kể đến tính đối xứng, các xác suất là

$$P(|\,x\,| < x_0) = 2\,|\,A\,|^2 \int_0^{x_0} e^{-2kx}\,dx = \frac{|\,A\,|^2}{k}\,(1 - e^{-2kx_0})\,,$$

$$P(-\infty < x < \infty) = 2\,|\,A\,|^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx}\,dx = \frac{|\,A\,|^2}{k}\,.$$

Từ điều kiện

$$1 - e^{-2kx_0} = \frac{1}{2}\,,$$

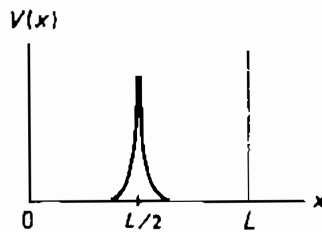
ta có

$$x_0 = \frac{1}{2k}\ln 2 = \frac{\hbar^2}{2ma}\ln 2\,.$$

1023

Một hạt khối lượng m chuyển động một chiều bị giới hạn trong vùng $0 < x < L$ bởi một hố thế vuông sâu vô hạn. Ngoài ra, hạt còn chịu một tác dụng của một hàm thế delta có độ lớn λ định vị tại tâm của hố thế (Hình 1.11). Phương trình Schrödinger mô tả hệ trong giới hạn của hố thế có dạng,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \lambda\delta(x - L/2)\,\psi(x) = E\psi(x), \quad 0 < x < L\,.$$



Hình 1.11

Hãy tìm một phương trình siêu việt xác định các trị riêng năng lượng E theo khối lượng m, độ lớn thế năng λ, và kích thước L của hệ.

Lời giải:

Tác dung $\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{L/2-\varepsilon}^{L/2+\varepsilon} dx$ lên hai vế của phương trình Schrödinger, ta được

$$\psi'(L/2+\varepsilon) - \psi'(L/2-\varepsilon) = (2m\lambda/\hbar^2)\,\psi(L/2)\,, \tag{1}$$

do

$$\int_{\frac{L}{2}-\varepsilon}^{\frac{L}{2}+\varepsilon} \psi(x)\,\delta\left(x-\frac{L}{2}\right)dx = \psi\left(\frac{L}{2}\right),\ \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{\frac{L}{2}-\varepsilon}^{\frac{L}{2}+\varepsilon} \psi(x)\,dx = 0\,.$$

Tính đến các điều kiện biên $\psi(0) = \psi(L) = 0$, phương trình Schrödinger có các nghiệm đối với $x \neq \frac{L}{2}$

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1\ \sin(kx), & 0 \le x \le L/2-\varepsilon \\ A_2\ \sin[k(x-L)], & L/2+\varepsilon \le x \le L\,, \end{cases}$$

ở đây $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ và ε là một hằng số dương nhỏ tuỳ ý. Tính liên tục của hàm sóng tại $L/2$ yêu cầu $A_1\sin(kL/2) = -A_2\sin(kL/2)$, hay $A_1 = -A_2$.

Thay thế hàm sóng vào (1), ta được

$$A_2 k\cos(kL/2) - A_1 k\cos(kL/2) = (2m\lambda A_1/\hbar^2)\sin(kL/2)\,,$$

với $\tan\frac{kL}{2} = -\frac{k\hbar^2}{m\lambda}$, hay $\tan\frac{\sqrt{2mE}\,L}{2\hbar} = -\sqrt{\frac{2E}{m}}\,\frac{\hbar}{\lambda}$. đó chính là phương trình siêu việt cho các trị riêng năng lượng E.

1024

Một hố thế năng một chiều sâu vô hạn giam giữ một hạt trong vùng $0 \le x \le L$. Hãy vẽ hàm sóng mô tả trạng thái riêng năng lượng cực tiểu của hạt. Nếu một thế năng đẩy dạng hàm delta, $H' = \lambda\delta(x-L/2)$ $(\lambda > 0)$ được thêm vào tại tâm hố, hãy vẽ dạng hàm sóng mới và cho biết năng lượng của hệ sẽ tăng lên hay giảm đi. Nếu năng lượng ban đầu là E_0, thì nó sẽ bằng bao nhiêu khi $\lambda \to \infty$?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Đối với hố thế vuông góc, hàm riêng tương ứng với trạng thái có năng

lượng cực tiểu và giá tri năng lượng của nó tương ứng là

$$\phi_0(x) = \sqrt{2/L}\ \sin(\pi x/L),$$

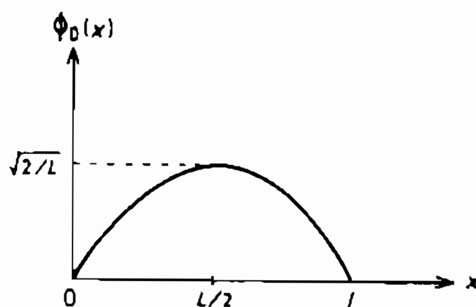
$$E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}.$$

Đồ thị biểu diễn hàm sóng đó được vẽ trên Hình 1.12.

Khi thêm hàm thế delta $H' = \lambda\delta(x - L/2)$, phương trình Schrödinger trở thành

$$\psi'' + [k^2 - \alpha\delta(x - L/2)]\,\psi = 0,$$

ở đây $k^2 = 2mE/\hbar^2, \alpha = 2m\lambda/\hbar^2$. Các điều kiện biên là



Hình 1.12

$$\psi(0) = \psi(L) = 0\,, \tag{1}$$

$$\psi'\left[\left(\frac{L}{2}\right)^+\right] - \psi'\left[\left(\frac{L}{2}\right)^-\right] = \alpha\psi(L/2)\,, \tag{2}$$

$$\psi\left[\left(\frac{L}{2}\right)^+\right] = \psi\left[\left(\frac{L}{2}\right)^-\right]. \tag{3}$$

Chú ý rằng (2) xuất hiện do lấy $\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{\frac{L}{2}-\varepsilon}^{\frac{L}{2}+\varepsilon} dx$ hai vế của phương trình Schrödinger và (3) xuất phát từ tính liên tục của $\psi(x)$ tại $x = \frac{L}{2}$.

Các nghiệm với $x \neq \frac{L}{2}$ thỏa mãn (1) là

$$\psi = \begin{cases} A_1\ \sin(kx), & 0 \le x \le L/2, \\ A_2\ \sin[k(x - L)], & L/2 \le x \le L\,. \end{cases}$$

Đặt $k = k_0$ ứng với trạng thái cơ bản. Điều kiện (3) yêu cầu rằng $A_1 = -A_2 = A$, và hàm sóng của trạng thái cơ bản trở thành

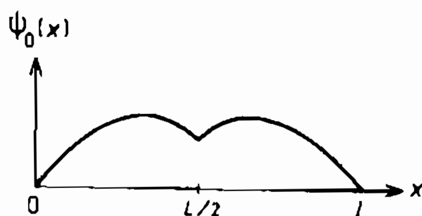
$$\psi_0(x) = \begin{cases} A \sin(k_0 x), & 0 \le x \le L/2, \\ -A \sin[k_0(x-L)], & L/2 \le x \le L. \end{cases}$$

Điều kiện (2) chỉ ra rằng k_0 là nghiệm nhỏ nhất của phương trình siêu việt

$$\cot(kL/2) = -\frac{m\lambda}{k\hbar^2}.$$

Do $\cot(\frac{kL}{2})$ âm nên, $\pi/2 \le k_0 L/2 \le \pi$, hay $\pi/L \le k_0 \le 2\pi/L$. Hàm sóng trạng thái cơ bản mới được mô tả trên Hình 1.13. Năng lượng tương ứng là $E = \hbar^2 k_0^2/2m \ge E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$, do $k_0 \ge \frac{\pi}{L}$. Như vậy năng lượng của trạng thái cơ bản mới tăng lên.

Hơn nữa, nếu $\lambda \to +\infty$, $k_0 \to 2\pi/L$ và năng lượng trạng thái cơ bản mới $E \to 4E_0$.



Hình 1.13

1025

Một hạt phi tương đối tính khối lượng m chuyển động một chiều với thế năng

$$V(x) = -g[\delta(x-a) + \delta(x+a)]$$

ở đây $g > 0$ là một hằng số và $\delta(x)$ là hàm delta Dirac. Hãy tìm hàm riêng năng lượng của trạng thái cơ bản và tìm một phương trình liên hệ trị riêng năng lượng tương ứng với hằng số g.

(*Berkeley*)

Lời giải:

Do $V(x) = V(-x)$, các hàm riêng năng lượng có tính chẵn lẻ xác định.

Trạng thái cơ bản có tính chẵn, $\psi(-x) = \psi(x)$. Đó là một trạng thái liên kết và năng lượng của nó âm, $E < 0$.

Đối với $x \geq 0$, phương trình Schrödinger là

$$[-(\hbar^2/2m)\, d^2/dx^2 - g\delta(x-a)]\, \psi(x) = E\psi(x)\,.$$

có các nghiệm với $x \neq a$ là $\psi \sim \exp(\pm kx)$, ở đây $k = \sqrt{2mE}/\hbar$

Với điều kiện hàm sóng vẫn còn hữu hạn khi $x \to \infty$ và có tính chẵn, ta thu được

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-kx}, & x > a, \\ B\cosh(kx), & 0 \leq x \leq a\,. \end{cases}$$

Tính liên tục của ψ tại $x = a$ yêu cầu $A = Be^{ka}\cosh(ka)$. Như vậy

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{ka}\cosh(ka)\, e^{-kx}, & x > a\,, \\ B\cosh(kx), & 0 \leq x \leq a\,. \end{cases}$$

Điều kiện chuẩn hóa $\int_0^a \psi^2\, dx + \int_a^\infty \psi^2\, dx = \frac{1}{2}$ dẫn đến

$$B = \left(\frac{e^{2ka}}{2k} + \frac{1+2ka}{2k}\right)^{-1/2}\,.$$

Tại $x = a$, xuất hiện sự gián đoạn của vi phân cấp một của hàm sóng (tham khảo **Bài tập 1024**)

$$\psi'(a^+) - \psi'(a^-) = -(2mg/\hbar^2)\, \psi(a)\,.$$

Thay thế biểu thức của ψ vào ta được hệ thức

$$k\,[1 + \tanh(ka)] = 2mg/\hbar^2\,,$$

mà k cần thỏa mãn. Do tính đối xứng hàm sóng trong toàn không gian sẽ như sau

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{ka}\cosh(ka)\, e^{-k|x|}, & |x| > a\,, \\ B\cosh(kx), & |x| \leq a\,. \end{cases}$$

1026

Mô hình gần đúng cho bài toán của nguyên tử ở gần thành hố thế là xét một hạt chuyển động dưới ảnh hưởng của một thế một chiều có dạng

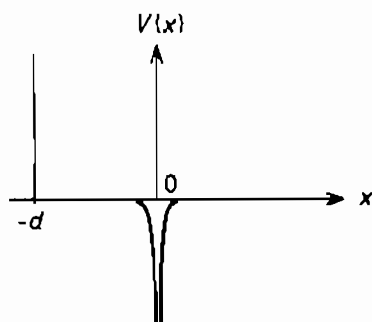
$$V(x) = -V_0\,\delta(x), \quad x > -d\,,$$
$$V(x) = \infty, \quad x < -d\,,$$

ở đây $\delta(x)$ là hàm "delta".

(a) Hãy tìm sự thay đổi năng lượng liên kết gây bởi thành hố thế khi hạt ở cách xa thành. Giải thích rõ cách xa là như thế nào.

(b) Điều kiện chính xác của V_0 và d để tồn tại ít nhất một trạng thái liên kết?

(*Buffalo*)



Hình 1.14

Lời giải:

(a) Thế năng được mô tả trên Hình 1.14. Trong phương trình Schrödinger

$$\psi'' + (2m/\hbar^2)\,[E + V_0\delta(x)]\,\psi = 0, \quad x > -d,$$

đặt $k = \sqrt{-2mE}/\hbar$, ở đây $E < 0$. Phương trình này có các nghiệm hình thức sau

$$\psi(x) = \begin{cases} ae^{kx} + be^{-kx} & \text{với} \quad -d < x < 0, \\ e^{-kx} & \text{với} \quad x > 0, \end{cases}$$

do $\psi(x)$ hữu hạn tại $x \to \infty$. Tính liên tục của hàm sóng và tính gián đoạn của vi phân cấp một của nó tại $x = 0$ (phương trình (1) của **Bài tập 1020**), cũng như yêu cầu $\psi(x = -d) = 0$, dẫn đến

$$a + b = 1,$$

$$k - (a - b)k = -2mV_0/\hbar^2,$$

$$ae^{-kd} + be^{kd} = 0.$$

Giải các phương trình này ta tìm được

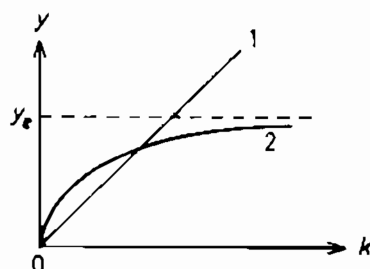
$$a = -\frac{e^{2kd}}{1 - e^{2kd}}, \quad b = \frac{1}{1 - e^{2kd}},$$

$$k = \frac{mV_0}{\hbar^2}\left(1 - e^{-2kd}\right).$$

Thành hố được xem là cách xa hạt nếu $kd \gg 1$, khi đó $k \approx mV_0/\hbar^2$. Một phép gần đúng tốt hơn cho $k \approx (mV_0/\hbar^2)[1 - \exp(-2mV_0\, d/\hbar^2)]$, dẫn tới năng lượng liên kết là

$$\begin{aligned} E = & -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{mV_0}{\hbar^2}\right)^2\left[1 - \exp\left(-\frac{2mV_0 d}{\hbar^2}\right)\right]^2 \\ \approx & -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}\left[1 - 2\exp\left(-\frac{2mV_0 d}{\hbar^2}\right)\right] \\ = & -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} + \frac{mV_0^2}{\hbar^2}\exp\left(-\frac{2mV_0 d}{\hbar^2}\right). \end{aligned}$$

Số hạng thứ hai trong biểu thức cuối cùng là sự thay đổi năng lượng gây bởi thành hố thế. Như vậy, để sự thay đổi năng lượng là nhỏ ta cần $d \gg 1/k = \hbar^2/mV_0$. Đó là ý nghĩa của khái niệm cách xa.



Hình 1.15

(b) Hình 1.15 cho thấy đường 1 biểu diễn sự phụ thuộc $y = k$ và đường cong 2 mô tả hàm $y = y_c[1 - \exp(-2kd)]$, ở đây $y_c = mV_0/\hbar^2$. Điều kiện để phương trình

$$k = mV_0[1 - \exp(-2kd)]/\hbar^2$$

có một nghiệm là độ dốc của đường cong 2 tại gốc tọa độ phải lớn hơn độ dốc của đường 1

$$\left.\frac{dy}{dk}\right|_{k=0} = 2mV_0 d/\hbar^2 > 1.$$

Như vậy, nếu $V_0 d > \frac{\hbar^2}{2m}$, thì sẽ tồn tại một trạng thái liên kết.

1027

Hàm sóng của trạng thái cơ bản của một dao động tử điều hòa có hằng số lực k và khối lượng m là

$$\psi_0(x) = (\alpha/\pi)^{1/4}\, e^{-\alpha x^2/2}, \quad \alpha = m\omega_0/\hbar, \quad \omega_0^2 = k/m\,.$$

Hãy tính xác suất tìm thấy hạt bên ngoài vùng giới hạn cổ điển.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Hạt được gọi là nằm ngoài vùng giới hạn cổ điển nếu $E < V(x)$. Đối với trạng thái cơ bản, $E = \hbar\omega_0/2$ và vùng phi cổ điển là $\frac{1}{2}\hbar\omega_0 < \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$, tức là,

$$x^2 > \frac{\hbar}{\omega_0 m} = \frac{1}{\alpha}, \quad \text{hay} \begin{cases} x > \sqrt{\frac{1}{\alpha}}, \\ x < -\sqrt{\frac{1}{\alpha}}. \end{cases}$$

Do đó, xác suất để tìm thấy hạt trong vùng phi cổ điển sẽ là

$$\begin{aligned} P &= \int_{|x|>\sqrt{\frac{1}{\alpha}}} \psi_0^2(x)\,dx \\ &= \int_{-\infty}^{\sqrt{1/\alpha}} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\, e^{-\alpha x^2}\,dx + \int_{\sqrt{1/\alpha}}^{\infty} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\, e^{-\alpha x^2}\,dx \\ &= 2\int_{\sqrt{1/\alpha}}^{\infty} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\, e^{-\alpha x^2}\,dx = 2\int_1^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}}\, e^{-t^2}\,dt \simeq 16\%\,. \end{aligned}$$

1028

Xét một dao động tử tuyến tính và đặt ψ_0 và ψ_1 là các hàm riêng thực và chuẩn hóa ứng với năng lượng ở trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích đầu tiên. Giả sử $A\psi_0 + B\psi_1$ với A và B các số thực là hàm sóng của dao động tử điều hòa ở một thời điểm nào đó. Hãy chỉ ra rằng giá trị trung bình của x nói

chung là khác không. Với những giá trị nào của A và B $\langle x\rangle$ có giá trị cực đại và cực tiểu?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Điều kiện chuẩn hóa

$$\int (A\psi_0 + B\psi_1)^2\, dx = 1$$

dẫn tới $A^2 + B^2 = 1$. Nhìn chung A và B khác không, vì vậy giá trị trung bình của x,

$$\langle x\rangle = \int x(A\psi_0 + B\psi_1)^2\, dx = 2AB\,\langle \psi_0\,|\,x\,|\,\psi_1\rangle$$

khác không. Viết lại phương trình trên thành

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= [1 - (A^2 + B^2 + 2AB)]\,\langle \psi_0\,|\,x\,|\,\psi_1\rangle\\ &= [1 - (A - B)^2]\,\langle \psi_0\,|\,x\,|\,\psi_1\rangle\end{aligned}$$

và xét $f = AB = A(1 - A^2)^{\frac{1}{2}}$, có các cực trị tại $A = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}$, ta thấy rằng nếu $A = B = 1/\sqrt{2}$, $\langle x\rangle$ là là cực đại; nếu $A = -B = 1/\sqrt{2}$, $\langle x\rangle$ là cực tiểu.

1029

Hãy chỉ ra rằng năng lượng cực tiểu của một dao động tử điều hòa là $\hbar\omega/2$ nếu $\Delta x\Delta p = \hbar/2$, ở đây $(\Delta p)^2 = \langle (p - \langle p\rangle)^2\rangle$.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Đối với một dao động tử, $\langle x\rangle = \langle p\rangle = 0$, và do vậy

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle, \quad (\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle\,.$$

Vì thế Hamiltonian của một dao động tử, $H = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$, dẫn đến năng lượng trung bình như sau

$$\langle H\rangle = \langle p^2\rangle/2m + m\omega^2\langle x^2\rangle/2 = \langle \Delta p\rangle^2/2m + m\omega^2\langle \Delta x\rangle^2/2\,.$$

Vì đối với a, b thực và dương ta có $(\sqrt{a} - \sqrt{b})^2 \ge 0$, hay $a + b \ge 2\sqrt{ab}$, suy ra

$$\langle H\rangle_{\min} = \langle \Delta p\rangle\langle \Delta x\rangle\omega = \hbar\omega/2\,.$$

1030

Một electron bị giới hạn trong trạng thái cơ bản của một dao động tử một chiều sao cho $\sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = 10^{-10}$ m. Hãy tìm năng lượng (theo eV) cần thiết để đưa nó lên trạng thái kích thích thứ nhất.

[Gợi ý: Vận dụng định lý virial]

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Định lý virial áp dụng cho dao động tử một chiều phát biểu rằng $\langle T \rangle = \langle V \rangle$. Như vậy $E_0 = \langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle = 2\langle V \rangle = m_e \omega^2 \langle x^2 \rangle$, hay đối với trạng thái cơ bản

$$\frac{\hbar\omega}{2} = m_e \omega^2 \langle x^2 \rangle .$$

dẫn đến

$$\omega = \frac{\hbar}{2m_e \langle x^2 \rangle} .$$

Do $\langle x \rangle = 0$ đối với một dao động tử điều hòa, nên

$$\sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = 10^{-10} \text{ m} .$$

Vì vậy năng lượng cần thiết để đưa electron lên trạng thái kích thích thứ nhất sẽ là

$$\Delta E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m_e \langle x^2 \rangle} = \frac{\hbar^2 c^2}{2m_e c^2 \langle x^2 \rangle}$$
$$= \frac{(6,58 \times 10^{-16})^2 \times (3 \times 10^8)^2}{2 \times 0,51 \times 10^{-20}} = 3,8 \text{ eV} .$$

1031

Hàm sóng tại thời điểm $t = 0$ đối với một hạt trong thế dao động tử điều hòa $V = \frac{1}{2} kx^2$, có dạng

$$\psi(x, 0) = Ae^{-(\alpha x)^2/2} \left[\cos\beta\, H_0(\alpha x) + \frac{\sin\beta}{2\sqrt{2}} H_2(\alpha x)\right] ,$$

ở đây β và A là các hằng số thực, $\alpha^2 \equiv \sqrt{mk}/\hbar$, và các đa thức Hermite được chuẩn hóa sao cho

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} [H_n(\alpha x)]^2 dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} 2^n n! .$$

(a) Viết biểu thức của $\psi(x, t)$.

(b) Phép đo năng lượng của hạt ở trạng thái này có thể có những kết quả như thế nào, và các xác suất tương đối để có những giá trị này là bao nhiêu?

(c) Tính $\langle x \rangle$ tại $t = 0$. $\langle x \rangle$ thay đổi như thế nào theo thời gian?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Phương trình Schrödinger của hệ là

$$i\hbar\partial_t \psi(x, t) = \hat{H}\psi(x, t),$$

ở đây $\psi(x, t)$ có giá trị $\psi(x, 0)$ đã cho tại $t = 0$. Do $\hat{H}$ không phụ thuộc tường minh vào t,

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar},$$

ở đây $\psi_n(x)$ là hàm riêng năng lượng thỏa mãn

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x).$$

Khai triển $\psi(x, 0)$ theo $\psi_n(x)$

$$\psi(x, 0) = \sum_n a_n \psi_n(x),$$

với

$$a_n = \int \psi_n^*(x)\, \psi(x, 0)\, dx.$$

Như vậy

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n\, \psi_n(x, t) = \sum_n a_n\, \psi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Đối với một dao động tử,

$$\psi_n(x) = N_n\, e^{-\alpha^2 x^2/2}\, H_n(\alpha x),$$

vì vậy

$$a_n = \int N_n e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x) \cdot A e^{-\alpha^2 x^2/2} \times \left[\cos\beta\, H_0(\alpha x) + \frac{\sin\beta}{2\sqrt{2}}\, H_2(\alpha x)\right] dx.$$

Do các hàm $\exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) H_n(x)$ là trực giao nên tất cả $a_n = 0$ ngoại trừ

$$a_0 = AN_0 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}} \cos\beta,$$

$$a_2 = AN_2 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}\, 2\sqrt{2} \sin\beta.$$

Do đó

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= A \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}} \left[N_0 \cos\beta\, \psi_0(x)\, e^{-iE_0t/\hbar}\right. \\ &\qquad \left. + 2\sqrt{2}\, N_2 \sin\beta\, \psi_2(x)\, e^{-iE_2t/\hbar}\right]. \\ &= A\left(\frac{\pi}{\alpha^2}\right)^{\frac{1}{4}} \left[\cos\beta\, \psi_0(x)\, e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}} + \sin\beta\, \psi_2(x)\, e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}\right],\end{aligned}$$

do N_n được tính bởi $\int[\psi_n(x)]^2\, dx = 1$ dẫn tới $N_0 = (\frac{\alpha^2}{\pi})^{\frac{1}{4}}$, $N_2 = \frac{1}{2\sqrt{2}}(\frac{\alpha^2}{\pi})^{\frac{1}{4}}$.

(b) Các giá trị năng lượng quan sát được đối với trạng thái này là $E_0 = \hbar\omega/2$ và $E_2 = 5\,\hbar\omega/2$, và xác suất tương đối để có các giá trị này là

$$P_0/P_2 = \cos^2\beta/\sin^2\beta = \cot^2\beta.$$

(c) Do $\psi(x, 0)$ là tổ hợp tuyến tính chỉ của hai hàm sóng có tính chẵn $\psi_0(x)$ và $\psi_2(x)$, nên

$$\psi(-x, 0) = \psi(x, 0).$$

Suy ra tại $t = 0$,

$$\langle x\rangle = \int \psi(x, 0)\, x\psi(x, 0)\, dx = 0.$$

Dẫn đến giá trị trung bình của x không thay đổi theo thời gian.

1032

(a) Đối với một hạt khối lượng m trong thế dao động tử điều hòa $V = m\omega^2x^2/2$, hãy viết nghiệm tổng quát nhất của phương trình Schrödinger, $\psi(x, t)$, qua các trạng thái riêng của dao động tử điều hòa $\phi_n(x)$.

(b) Sử dụng (a) để chỉ ra rằng giá trị trung bình của x, $\langle x\rangle$, như một hàm của thời gian có thể được viết thành $A\cos\omega t + B\sin\omega t$, ở đây A và B là các hằng số.

(c) Sử dụng (a) để chỉ ra một cách tường minh rằng trung bình theo thời gian của thế năng thỏa mãn $\langle V \rangle = \frac{1}{2}\langle E \rangle$ đối với hàm sóng tổng quát $\psi(x, t)$.

Chú ý đẳng thức

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\phi_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}}\, \phi_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\, \phi_{n-1}\,.$$

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Từ phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\, \psi(x, t) = \hat{H}\psi(x, t)\,,$$

do $\hat{H}$ không phụ thuộc tường minh vào thời gian nên ta có thể viết

$$\psi(x, t) = e^{-iHt/\hbar}\, \psi(x, 0)\,.$$

Ta có thể khai triển $\psi(x, 0)$ dưới dạng $\phi_n(x)$

$$\psi(x, 0) = \sum_n a_n \phi_n(x)\,,$$

với

$$a_n = \langle \phi_n(x) \,|\, \psi(x, 0)\rangle\,,$$

và $\phi_n(x)$ là các hàm riêng của

$$H\phi_n(x) = E_n\phi_n(x), \quad \text{với} \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega\,.$$

Do đó

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n\phi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar}\,.$$

(b) Sử dụng đẳng thức đã cho ta có

$$\langle x\rangle = \int \psi^*(x,t)\, x\psi(x,t)\, dx$$
$$= \sum_{n,n'} a_n^* a_{n'}\, e^{-i(E_{n'}-E_n)t/\hbar} \int \phi_n^*(x)\, x\phi_{n'}(x)\, dx$$
$$= \sum_{n,n'} a_n^* a_{n'}\, e^{-i(E_{n'}-E_n)t/\hbar} \left(\sqrt{\frac{n'+1}{2}}\,\delta_{n,n'+1} + \sqrt{\frac{n'}{2}}\,\delta_{n,n'-1}\right)\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$
$$= \sum_n a_n^* \left(a_{n-1}\sqrt{\frac{n}{2}}\, e^{i\omega t} + a_{n+1}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\, e^{-i\omega t}\right)\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$
$$= A\cos\omega t + B\sin\omega t\,,$$

ở đây

$$A = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sum_n a_n^* \left(a_{n-1}\sqrt{\frac{n}{2}} + a_{n+1}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\right),$$
$$B = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sum_n i a_n^* \left(a_{n-1}\sqrt{\frac{n}{2}} - a_{n+1}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\right),$$

và ta đã sử dụng $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$.

(c) Trung bình theo thời gian của thế năng có thể được coi là trung bình theo thời gian của trung bình theo tập hợp của toán tử $\hat{V}$ tác dụng lên $\psi(x,t)$. Ta chỉ cần lấy trung bình theo thời gian trên một chu kì $T = 2\pi/\omega$. Kí hiệu $\langle A\rangle$ và $\bar{A}$ tương ứng là trung bình thời gian và trung bình theo tập hợp của một toán tử A. Do

$$V|\psi\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega\cdot\frac{m\omega}{\hbar}\, x^2|\psi\rangle$$
$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\sum a_n\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\phi_n(x)\, e^{i\frac{E_n t}{\hbar}}$$
$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\sum_{n=0}^{\infty} a_n\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}\,|n+1\rangle + \sqrt{\frac{n}{2}}\,|n-1\rangle\right) e^{-i\omega(n+1/2)t}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty} a_n \left[\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{2}}\,|n+2\rangle \right.$$

$$\left. + \left(n+\frac{1}{2}\right)|n\rangle + \sqrt{\frac{n(n-1)}{2}}\,|n-2\rangle\right] e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}},$$

ta có

$$\bar{V} = \langle\psi|V|\psi\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty} a_n^* a_n \left(n+\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty} a_{n+2}^*$$

$$\times\, a_n \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}\, e^{i2\omega t} + \frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty} a_n$$

$$\times\, a_{n+2}^* \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}\, e^{-i2\omega t}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty} a_n^* a_n \left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$+ \frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty} |a_{n+2}^* a_n|\,\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\cos(2\omega t+\delta_n),$$

ở đây δ_n là pha của $a_{n+1}^* a_n$. Lấy trung bình của $\bar{V}$ trên một chu kì, do số hạng thứ hai bằng không nên ta được

$$\langle V\rangle = \frac{1}{T}\int_0^T \bar{V}\,dt = \frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty} a_n^* a_n\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Mặt khác,

$$\bar{E} = \langle\psi|H|\psi\rangle = \hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty} a_n^* a_n\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

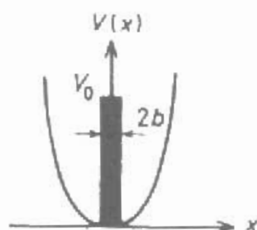
và $\langle E\rangle = \bar{E}$. Do đó $\langle V\rangle = \langle E\rangle/2$.

1033

Xét một hạt có khối lượng m ở trong hố thế một chiều

$$V(x) = m\omega^2 x^2/2, \quad |x| > b;$$
$$V(x) = V_0, \quad |x| < b,$$

ở đây $V_0 \gg \hbar^2/mb^2 \gg \hbar\omega$, nghĩa là một thế năng dao động tử điều hòa với một hàng rào thế mỏng, cao và hầu như không thể đi xuyên qua được tại $x = 0$ (xem Hình 1.16).



Hình 1.16

(a) Xác định phổ năng lượng nằm thấp trong gần đúng hàng rào thế không thể xuyên qua được.

(b) Mô tả định tính hiệu ứng tác động lên phổ khi hàng rào thế có thể xuyên qua được một phần.

(MIT)

Lời giải:

(a) Đối với phổ năng lượng nằm thấp, do rào thế không thể xuyên qua được nên thế năng bằng hai nửa riêng biệt của thế dao động tử điều hòa và các hàm riêng mức thấp phải thỏa mãn điều kiện $\psi(x) = 0$ tại $x = 0$. Phổ năng lượng nằm thấp như vậy tương ứng với phổ của một dao động tử điều hòa thông thường với các số lượng tử lẻ $2n + 1$, đối với nó $\psi_n(x) = 0$, ở $x = 0$ và $E_n = (2n + 3/2)\hbar\omega$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ với bội suy biến là 2. Như vậy, chỉ các hàm sóng lẻ là được phép ở các mức năng lượng thấp.

(b) Giả sử tồn tại sự xuyên ngầm yếu của rào thế. Hiển nhiên xác suất để hạt trong khoảng $|x| < b$, ở đó tồn tại rào thế, trở nên nhỏ hơn xác suất trong trường hợp không có rào thế, trong khi đó xác suất bên ngoài rào thế trở nên tương đối lớn hơn. Một tỉ phần nhỏ của các nghiệm chẵn được trộn vào các trạng thái hạt, trong khi đó ở gần gốc tọa độ phân bố xác suất của các trạng thái chẵn lớn hơn phân bố xác suất của các trạng thái lẻ. Tương ứng, một tỉ phần nhỏ năng lượng $E'_n = (2n + 1/2)\hbar\omega$ bị trộn vào năng lượng trong trường hợp (a). Do $\langle\psi|$ rào thế $|\psi\rangle > 0$, nên các mức năng lượng sẽ dịch lên phía trên. Sự dịch năng lượng đối với các trạng thái chẵn lớn hơn sự dịch năng lượng của các trạng thái lẻ. Hơn nữa, sự dịch năng lượng là nhỏ hơn đối với các giá

trị năng lượng lớn hơn của các trạng thái có cùng tính chẵn lẻ.

1034

Hamiltonian của một dao động tử điều hòa có thể được viết trong hệ không thứ nguyên ($m = \hbar = \omega = 1$) như sau

$$\hat{H} = \hat{a}^+\hat{a} + 1/2\,,$$

ở đây

$$\hat{a} = (\hat{x} + i\hat{p})/\sqrt{2}, \quad \hat{a}^+ = (\hat{x} - i\hat{p})/\sqrt{2}\,.$$

Một hàm riêng năng lượng chưa chuẩn hóa có dạng

$$\psi_a = (2x^3 - 3x)\, exp\,(-x^2/2)\,.$$

Hãy tìm hai hàm riêng khác (chưa chuẩn hóa) có mức năng lượng gần nhất với ψ_a.

(*MIT*)

Lời giải:

Trong biểu diễn Fock đối với dao động tử điều hòa, $\hat{a}$ và $\hat{a}^+$ là các toán tử hủy và sinh thỏa mãn các điều kiện.

$$\hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}, \quad \hat{a}^+\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}, \quad \hat{a}\hat{a}^+\psi_n = (n+1)\,\psi_n\,,$$
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots\,.$$

Do

$$\begin{aligned}
\hat{a}\hat{a}^+\psi_a &= \frac{1}{2}\left(x + \frac{d}{dx}\right)\left(x - \frac{d}{dx}\right)(2x^3 - 3x)\, e^{-\frac{x^2}{2}} \\
&= \frac{1}{2}\left(x + \frac{d}{dx}\right)(4x^4 - 12x^2 + 3)\, e^{-\frac{x^2}{2}} \\
&= 4(2x^3 - 3x)\, e^{-\frac{x^2}{2}} = (3 + 1)\,\psi_a\,,
\end{aligned}$$

ta có $n = 3$. Như vậy, các hàm riêng có năng lượng gần nhất với ψ_a có $n = 2,\, 4$.

các hàm sóng chưa chuẩn hóa là

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}\,\hat{a}\psi_a = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(x + \frac{d}{dx}\right)(2x^3 - 3x)\,e^{-x^2/2}$$
$$\sim (2x^2 - 1)\,e^{-x^2/2},$$
$$\psi_4 = \frac{1}{2}\,\hat{a}^+\psi_a = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(x - \frac{d}{dx}\right)(2x^3 - 3x)\,e^{-x^2/2}$$
$$\sim (4x^4 - 12x^2 + 3)\,e^{-x^2/2}.$$

ở đây các hằng số không quan trọng đã được bỏ qua.

1035

Tại thời điểm $t = 0$ một hạt trong thế năng $V(x) = m\omega^2x^2/2$ được mô tả bởi hàm sóng

$$\psi(x,0) = A\sum_n (1/\sqrt{2})^n\,\psi_n(x),$$

ở đây $\psi_n(x)$ là các trạng thái riêng ứng với các trị riêng năng lượng $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. Cho trước $(\psi_n, \psi_{n'}) = \delta_{nn'}$.

(a) Hãy tìm hằng số chuẩn hóa A.

(b) Viết biểu thức cho $\psi(x,t)$ với $t > 0$.

(c) Hãy chỉ ra rằng $|\psi(x,t)|^2$ là một hàm tuần hoàn theo thời gian và chỉ ra chu kì τ dài nhất.

(d) Tìm giá trị trung bình của năng lượng tại $t = 0$

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Điều kiện chuẩn hóa

$$(\psi(x,0), \psi(x,0)) = |A|^2\sum_{m,n}(1/2)^{(m+n)/2}(\psi_n, \psi_m)$$
$$= |A|^2\sum_m\left(\frac{1}{2}\right)^m = 2|A|^2 = 1$$

dẫn tới $A = 1/\sqrt{2}$, chọn A có giá trị dương và thực.

(b) Hàm sóng phụ thuộc vào thời gian là

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(x,0)\\ &= \sum_n \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{n+1} e^{-i\omega t(n+\frac{1}{2})}\,\psi_n(x)\,.\end{aligned}$$

(c) Mật độ xác suất là

$$|\psi(x,t)|^2 = \sum_{mn}\left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{m+n}{2}+1} e^{-i\omega t(n-m)}\,\psi_n(x)\,\psi_m^*(x)\,.$$

Chú ý rằng thừa số phụ thuộc thời gian $\exp[-i\omega(n-m)t]$ là một hàm với chu kì $\frac{2\pi}{(n-m)\omega}$, chu kì cực đại là $2\pi/\omega$.

(d) Giá trị trung bình của năng lượng là

$$\begin{aligned}\bar{H} &= (\psi(x,0),\,\hat{H}\psi(x,0)) = \sum_{m,n}\left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{m+n}{2}+1}(\psi_n,\,\hat{H}\psi_m)\\ &= \sum_{m,n}\left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{m+n}{2}+1}\left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,\delta_{nm}\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2^{n+1}}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,.\end{aligned}$$

Chú ý

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{x^n} = \frac{x}{x-1}\,,$$

hay, bằng cách lấy vi phân

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{-n}{x^{n+1}} = \frac{-1}{(x-1)^2}\,,$$

ta có

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{n}{2^{n+1}} = 1\,.$$

và như vậy $\bar{H} = 3\hbar\omega/2$.

1036

Xét chuyển động một chiều của một hạt khối lượng μ trong trường thế

$$V(x) = V_0(x/a)^{2n},$$

ở đây n là một số nguyên dương và $V_0 > 0$. Hãy thảo luận định tính về phân bố các trị riêng năng lượng và tính chẵn lẻ của các hàm riêng tương ứng, nếu có. Sử dụng nguyên lý bất định để đánh giá cỡ độ lớn của trị riêng năng lượng thấp nhất. Đánh giá cho trường hợp đặc biệt $n = 1$ và $n \to \infty$. Hãy cho biết trong các hợp đó $V(x)$ sẽ như thế nào và so sánh các giá trị ước tính được với ước tính đã biết.

(*Buffalo*)

Lời giải:

Vì thế năng $V(x) \to \infty$ khi $x \to \infty$, nên sẽ tồn tại một số vô hạn các trạng thái liên kết trong trường thế và các trị riêng năng lượng là gián đoạn. Cũng như vậy, trạng thái kích thích thứ m sẽ phải có m nút trong vùng $E > V(x)$ xác định bởi $k\Delta x \simeq (m+1)\pi$. Δx chỉ tăng khi m tăng. Từ định lý virial $2\bar{T} \propto 2n\bar{V}$, ta có

$$k^2 \propto (\Delta x)^{2n} \propto [(m+1)\pi/k]^{2n}.$$

và như vậy

$$E \propto k^2 \propto (m+1)^{2n/(n+1)}.$$

Nhìn chung, khi n tăng, hiệu giữa các mức năng lượng kề nhau cũng tăng lên. Do $V(-x) = V(x)$, nên các trạng thái riêng có tính chẵn lẻ xác định. Trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích thứ hai, thứ tư, ... có tính chẵn trong khi đó các trạng thái còn lại có tính lẻ.

Sử dụng nguyên lý bất định có thể đánh giá được năng lượng của hạt

$$p_x \sim \hbar/2b,$$

ở đây

$$b = \sqrt{\overline{(\Delta x)^2}}.$$

Như vậy

$$E \sim \frac{1}{2\mu}(\hbar/2b)^2 + V_0(b/a)^{2n}.$$

Đối với năng lượng thấp nhất đặt $dE/db = 0$ và nhận được

$$b = (\hbar^2 a^{2n}/8\mu n V_0)^{1/2(n+1)} .$$

Như vậy, năng lượng thấp nhất là

$$E \sim |(n+1)V_0/a^{2n}| \, (\hbar^2 a^{2n}/8\mu n V_0)^{n/(n+1)} .$$

Đối với $n = 1$, $V(x)$ là thế năng của một dao động tử điều hòa,

$$V(x) = V_0 x^2/a^2 = \mu\omega^2 x^2/2 .$$

Trong trường hợp này E bằng $\hbar\omega/2$, phù hợp với kết quả tính toán chính xác. Đối với $n = \infty$, $V(x)$ là một hố thế vuông sâu vô hạn, và

$$E = \hbar^2/8\mu a^2 ,$$

so với kết quả chính xác là $\hbar^2\pi^2/2\mu a^2$.

1037

Xét một hạt trong bài toán một chiều với Hamiltonian

$$H = p^2/2m + V(x) ,$$

ở đây $V(x) \leq 0$ đối với tất cả x, $V(\pm\infty) = 0$, và V không bằng không ở đâu cả. Hãy chỉ ra rằng tồn tại ít nhất một trạng thái liên kết. (Một phương pháp có thể sử dụng là nguyên lý biến thiên Rayleigh-Ritz với hàm sóng thử

$$\psi(x) = (b/\pi)^{1/4} \, \exp(-bx^2/2) .$$

Tuy nhiên, bạn có thể sử dụng các cách khác, nếu muốn.)

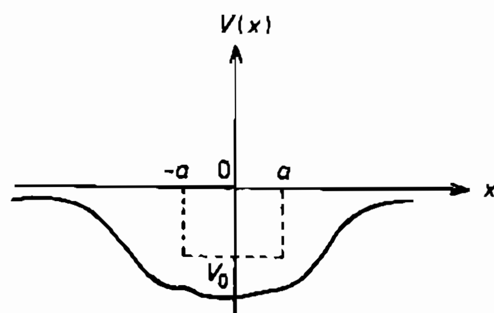
(*Columbia*)

Lời giải:

Phương pháp 1:

Giả thiết thế năng $V(x) = f(x)$ như chỉ ra trên Hình 1.17. Ta lấy một hố thế vuông góc $V'(x)$ trong thế năng $V(x)$ sao cho

$$V'(x) = -V_0, \quad |x| < a,$$
$$V'(x) = 0, \quad |x| > a,$$
$$V'(x) \geq f(x) \quad \text{đối với tất cả các giá trị } x .$$



Hình 1.17

Ta biết có ít nhất một trạng thái liên kết $\varphi(x)$ trong hố thế $V'(x)$ với

$$\begin{aligned}\langle \varphi(x) | H' | \varphi(x) \rangle &= \langle \varphi | p^2/2m + V'(x) | \varphi \rangle \\ &= E_0 < 0 .\end{aligned}$$

Như vậy, ta có

$$\begin{aligned}\langle \varphi | H | \varphi \rangle &= \langle \varphi | p^2/2m + f(x) | \varphi \rangle \\ &\leq \langle \varphi | p^2/2m + V'(x) | \varphi \rangle \\ &= E_0 < 0 .\end{aligned}$$

Kí hiệu $\cdots \psi_{n-1}(x), \psi_n(x), \cdots$ các hàm riêng của H, và khai triển

$$\varphi(x) = \sum_n C_n \psi_n(x) .$$

Do

$$\langle \varphi | H | \varphi \rangle = \sum_n^{\infty} |C_n|^2 \langle \psi_n | H | \psi_n \rangle < 0 ,$$

có ít nhất một hàm riêng $\psi_i(x)$ thỏa mãn bất đẳng thức

$$\langle \psi_i | H | \psi_i \rangle < 0 .$$

Như vậy, tồn tại ít nhất một trạng thái liên kết trong $V(x)$.

Phương pháp 2: Đặt hàm sóng là

$$\psi(x) = (b/\pi)^{1/4} \exp(-bx^2/2) ,$$

ở đây b là một tham số chưa xác định. Ta có

$$\begin{aligned}\langle H\rangle &= \sqrt{b/\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2/2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)e^{-bx^2/2}\,dx+\langle V\rangle\\ &=\hbar^2 b/4m+\langle V\rangle\,.\end{aligned}$$

ở đây

$$\langle V\rangle=(b/\pi)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}V(x)\,\exp\left(-bx^2\right)dx\,,$$

và do đó

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial b} &= \frac{\hbar^2}{4m}+\frac{1}{2b}\langle V\rangle-\left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2V(x)\,e^{-bx^2}\,dx\\ &=\frac{\hbar^2}{4m}+\frac{1}{2b}\langle V\rangle-\langle x^2V\rangle=0\,,\end{aligned}$$

dẫn tới

$$b=\frac{\langle V\rangle}{2\left[\langle x^2V\rangle-\dfrac{\hbar^2}{4m}\right]}\,.$$

Thay thế vào biểu thức của $\langle H\rangle$ ta được

$$\bar{E}=\langle H\rangle=\frac{\left[2\langle x^2V\rangle-\dfrac{\hbar^2}{4m}\right]\langle V\rangle}{2\left[\langle x^2V\rangle-\dfrac{\hbar^2}{4m}\right]}\,.$$

Do $V(x)\le 0$ đối với tất cả các giá trị x, $V(\pm\infty)=0$, và V không bằng không ở đâu cả, ta có $\langle V\rangle<0$, $\langle x^2V\rangle<0$ và như vậy $\bar{E}<0$, $b>0$.

Thực tế, dưới điều kiện năng lượng toàn phần có một giá trị âm nào đó (phải lớn hơn $\langle V\rangle$ để làm $\langle T\rangle$ dương), bất kể dạng của V như thế nào một hạt trong thế năng đó không thể chuyển động ra vô hạn và phải nằm ở trạng thái liên kết.

1038

Hàm sóng đối với một hạt khối lượng M trong thế một chiều $V(x)$ được cho bởi biểu thức

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\alpha x\,\exp(-\beta x)\,\exp(i\gamma t/\hbar), & x>0,\\ &=0, & x<0.\end{aligned}$$

ở đây α, β và γ là các hằng số dương.

(a) Hạt có ở trạng thái liên kết không? Giải thích.

(b) Mật độ xác suất $\rho(E)$ để đo được năng lượng toàn phần E của hạt là bao nhiêu?

(c) Tìm trị riêng năng lượng thấp nhất của $V(x)$ qua các đại lượng cho trước.

(MIT)

Lời giải:

(a) Hạt ở trạng thái liên kết bởi vì hàm sóng $\psi(x, t)$ thỏa mãn

$$\lim_{x\to-\infty} \psi(x, t) = 0,$$

$$\lim_{x\to+\infty} \psi(x, t) = \lim_{x\to+\infty} \alpha x e^{-\beta x} e^{i\gamma t/\hbar} = 0\,.$$

(b), (c) Thế hàm sóng ứng với $x > 0$ vào phương trình Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right] \psi(x, t)$$

dẫn đến

$$-\gamma x = -\frac{\hbar^2}{2M} (\beta^2 x - 2\beta) + V(x) x\,,$$

với thế năng ứng với $x > 0$ là

$$V(x) = -\gamma + \frac{\hbar^2}{2M} (\beta^2 - 2\beta/x)\,.$$

Vì hàm sóng dừng của hạt trong $V(x)$ thỏa mãn

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{d^2}{dx^2} - \beta^2 + 2\beta/x\right) \psi_E(x) = (E + \gamma)\, \psi_E(x), \quad (x > 0)$$

hay

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_E(x) + \frac{2M}{\hbar^2} (E' + e^2/x)\, \psi_E(x) = 0$$

với

$$E' = E + \gamma - \beta^2\hbar^2/2M, \quad e^2 = \beta\hbar^2/M\,,$$

và $\psi_E(x) \xrightarrow{x\to 0} 0$, ta thấy rằng phương trình trên giống phương trình thỏa mãn bởi hàm sóng phụ thuộc bán kính của nguyên tử hydro với $l = 0$. Bán kính Bohr tương ứng là $a = \hbar^2/Me^2 = 1/\beta$, trong khi các mức năng lượng là

$$E'_n = -Me^4/2\hbar^2 n^2 = -\beta^2\hbar^2/2Mn^2, \quad n = 1, 2, \dots .$$

Như vậy

$$E_n = -\gamma + (\beta^2\hbar^2/2M)(1 - 1/n^2). \quad n = 1, 2, \dots ,$$

và do đó trị riêng năng lượng thấp nhất là $E_1 = -\gamma$ với hàm sóng

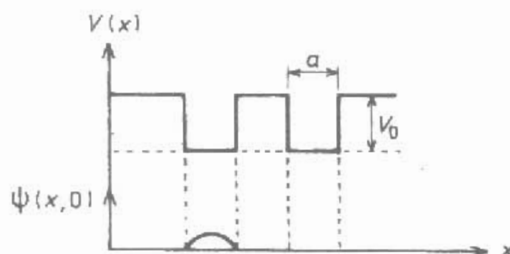
$$\psi(x, t) = \alpha x \exp(-\beta x) \exp(i\gamma t/\hbar) \propto \psi_{E1}(x) \exp(-iE_1 t/\hbar) .$$

Mật độ xác suất $\rho(E) = \psi^*\psi = \psi^*_{E1}\psi_{E1}$ sẽ là

$$\rho(E) = \begin{cases} 1 & \text{với } E = -\gamma , \\ 0 & \text{với } E \neq -\gamma . \end{cases}$$

1039

Một hạt khối lượng m được giải phóng tại $t = 0$ vào một hố thế vuông góc kép như chỉ ra trên Hình 1.18 theo cách sao cho hàm sóng của nó tại $t = 0$ chỉ là một vòng hình sin (nửa sóng sin) với các nút nằm trùng với biên nửa trái của hố thế như mô tả trên hình



Hình 1.18

(a) Tìm giá trị trung bình của năng lượng tại $t = 0$ (qua các đại lượng cho trên hình vẽ).

(b) Giá trị trung bình của năng lượng có bằng hằng số hay không ở các lần giải phóng hạt tiếp theo? Tại sao?

(c) Trạng thái này có năng lượng xác định hay không? (Có nghĩa là, phép đo năng lượng trong trạng thái này có luôn cho một giá trị như nhau hay không?) Tại sao?

(d) Hàm sóng có thay đổi theo thời gian hay không so với giá trị của nó tại $t = 0$? Nếu có, hãy giải thích rõ ta sẽ phải tính toán sự thay đổi hàm sóng như thế nào. Nếu không, giải thích tại sao không.

(e) Hạt có thể thoát khỏi hố thế hay không (thoát khỏi toàn bộ hố thế, từ cả hai nửa)? Giải thích.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Hàm sóng chuẩn hóa tại $t = 0$ là $\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}$. Như vậy

$$\begin{aligned}\langle \hat{H} \rangle_{t=0} &= -V_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \frac{d^2}{dx^2} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma} - V_0 .\end{aligned}$$

(b) $\langle \hat{H} \rangle$ là một hằng số với $t > 0$. Do $\partial \langle \hat{H} \rangle / \partial t = 0$.

(c) Đây không phải là trạng thái có năng lượng xác định, bởi vì hàm sóng của trạng thái ban đầu là hàm riêng của một hố thế vuông sâu vô hạn với độ rộng a, chứ không phải của hố thế đã cho. Đó là một trạng thái chồng chất của các trạng thái riêng ứng với các năng lượng khác nhau của thế năng cho trước. Như vậy, các phép đo năng lượng khác nhau trong trạng thái này sẽ không cho các giá trị giống nhau mà cho một nhóm các giá trị năng lượng theo xác suất của chúng.

(d) Hình dạng của hàm sóng sẽ phụ thuộc thời gian bởi vì nghiệm thỏa mãn các điều kiện cho trước là một trạng thái chồng chất

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \sum_n c_n \psi_n(x) ,$$

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) \, e^{-iE_n t/\hbar} .$$

Hình dạng của $\psi(x, t)$ sẽ thay đổi theo thời gian bởi vì E_n thay đổi theo n.

(e) Hạt có thể thoát khỏi toàn bộ hố thế nếu điều kiện sau được thỏa mãn $\hbar^2\pi^2/2ma > V_0$. Điều này nói lên rằng nếu độ rộng của hố thế là đủ nhỏ (tức

là động năng của hạt đủ lớn) thì độ sâu không quá lớn (tức là giá trị của V_0 không quá lớn), và năng lượng của hạt là dương, thì hạt có thể thoát ra khỏi toàn bộ hố thế.

1040

Một hạt tự do có khối lượng m chuyển động một chiều. Tại thời điểm $t = 0$ hàm sóng chuẩn hóa của hạt là

$$\psi(x, 0, \sigma_x^2) = (2\pi\sigma_x^2)^{-1/4} \exp(-x^2/4\sigma_x^2),$$

ở đây $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle$.

(a) Tính độ bất định của xung lượng $\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$ đi đôi với hàm sóng trên.

(b) Chứng tỏ rằng tại thời điểm $t > 0$ mật độ xác suất của hạt có dạng

$$|\psi(x, t)|^2 = |\psi(x, 0, \sigma_x^2 + \sigma_p^2 t^2/m^2)|^2 .$$

(c) Giải nghĩa kết quả của các câu (a) và (b) nhờ nguyên lý bất định.

(*Columbia*)

Lời giải:

(a) Do

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi \, dx \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/2}} \left(-\frac{x}{2\sigma_x^2}\right) e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \, dx = 0,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) \psi \, dx \\ &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/2}} \left\{-\frac{1}{2\sigma_x^2} + \frac{x^2}{4\sigma_x^4}\right\} \\ &\quad \times e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \, dx = \hbar^2/4\sigma_x^2,\end{aligned}$$

$$\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \frac{\hbar}{2\sigma_x} .$$

(b) Dùng phép biến đổi Fourier,

$$\psi(p,\,0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int e^{-ipx/\hbar}\, \psi(x,\,0)\, dx$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int e^{-ipx/\hbar} \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} \times \exp\,(-x^2/4\sigma_x^2)\, dx$$

$$= [(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}/\sqrt{2}\pi\hbar]\, \exp\,[-\sigma_x^2 p^2/\hbar^2]\,.$$

Do đó

$$\psi(p,\,t) = \psi(p,\,0)\, e^{-iEt/\hbar}\,,$$

ở đây

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

đối với một hạt tự do. Dùng phép biến đổi Fourier ngược

$$\psi(x,\,t) = \int e^{ipx/\hbar}\, \psi(p,\,t)\, dp = \frac{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}}{\sqrt{2}\,(\pi\hbar)} \int e^{ipx/\hbar} \exp\left(-i\,\frac{p^2}{2m\hbar}\,t\right)$$

$$\times \exp\left(-\frac{\sigma_x^2 p^2}{\hbar^2}\right)\, dp = \left(\frac{\sigma_x^2}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\left(\sigma_x^2 + i\,\dfrac{\hbar t}{2m}\right)^{1/2}}$$

$$\times \exp\left[-\frac{x^2}{4\left(\sigma_x^2 + i\,\dfrac{\hbar t}{2m}\right)}\right].$$

$$|\,\psi(x,\,t)\,|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\left(\sigma_x^2 + \dfrac{\sigma_p^2 t^2}{m^2}\right)}} \exp\left[-\frac{x^2}{2}\,\frac{1}{\sigma_x^2 + \dfrac{\sigma_p^2 t^2}{m^2}}\right]$$

$$= |\psi(x,\,0,\,\sigma_x^2 + \sigma_p^2 t^2 m^{-2})\,|^2\,.$$

(c) Thảo luận:

(i) Các kết quả chỉ ra độ rộng của bó sóng Gauss tại thời điểm t (ban đầu là σ_x tại $t = 0$) là

$$\sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_p^2 t^2/m^2}\,,$$

ở đây $\sigma_p^2 = \hbar^2/4\sigma_x^2$.

(ii) Do $\sigma_x\sigma_p = \hbar/2$, nên nguyên lý bất định được thỏa mãn.

1041

Một hạt khối lượng m chuyển động một chiều dưới ảnh hưởng của một thế $V(x)$. Giả thiết hạt ở trạng thái $\psi(x) = (\gamma^2/\pi)^{1/4}\ \exp(-\gamma^2 x^2/2)$ với năng lượng $E = \hbar^2\gamma^2/2m$.

(a) Hãy tìm vị trí trung bình của hạt.

(b) Tìm xung lượng trung bình của hạt.

(c) Tìm $V(x)$.

(d) Tìm xác suất $P(p)\ dp$ để xung lượng của hạt nằm trong khoảng p và $p + dp$.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Vị trí trung bình của hạt là

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x\psi(x)\ dx = \frac{\gamma}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-\gamma^2x^2}\ dx = 0\,.$$

(b) Xung lượng trung bình là

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\ \frac{\hbar}{i}\left(\frac{d}{dx}\ \psi(x)\right) dx$$

$$= \frac{\gamma\hbar}{i\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma^2x^2/2}\ \frac{d}{dx}\,(e^{-\gamma^2x^2/2})\, dx = 0\,.$$

(c) Phương trình Schrödinger

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\ \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

có thể được viết thành

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\ \frac{d^2}{dx^2}\ \psi(x) = [E - V(x)]\,\psi(x)\,.$$

Do

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\ \frac{d^2}{dx^2}\ e^{-\gamma^2x^2/2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,(-\gamma^2 + \gamma^4x^2)\,e^{-\gamma^2x^2/2}\,,$$

ta có

$$E - V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}(-\gamma^2 + \gamma^4 x^2),$$

hay

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}(\gamma^4 x^2 - \gamma^2) + \frac{\hbar^2\gamma^2}{2m} = \frac{\hbar^2\gamma^4 x^2}{2m}.$$

(d) Phương trình Schrödinger trong biểu diễn xung lượng là

$$\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^4\gamma^4}{2m}\frac{d^2}{dp^2}\right)\psi(p) = E\psi(p).$$

Đặt

$$\psi(p) = Ne^{-ap^2}$$

và thế nó vào phương trình trên, ta có

$$\frac{p^2}{2m}e^{-ap^2} - \frac{\hbar^4\gamma^4}{2m}(-2a + 4a^2p^2)e^{-ap^2} = Ee^{-ap^2},$$

hay

$$4a^2p^2 - 2a = \frac{1}{\hbar^2\gamma^2}\left(\frac{p^2}{\hbar^2\gamma^2} - 1\right).$$

Do tham số a độc lập với p, hệ thức trên có thể được thỏa mãn với $a = 1/2\hbar^2\gamma^2$. Như vậy

$$\psi(p) = N\exp(-p^2/2\hbar^2\gamma^2).$$

Đây là hàm riêng của trạng thái với năng lượng $\hbar^2\gamma^2/2m$ trong biểu diễn xung lượng. Chuẩn hóa dẫn đến $N = (1/\hbar^2\gamma^2\pi)^{1/4}$. Như vậy, xác suất để xung lượng của hạt nằm trong khoảng p và $p + dp$ là

$$P(p)\,dp = |\psi(p)|^2\,dp = \left(\frac{1}{\hbar^2\gamma^2\pi}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{p^2}{\hbar^2\gamma^2}\right)dp.$$

Chú ý rằng $\psi(p)$ có thể thu được trực tiếp bằng phép biến đổi Fourier hàm $\psi(x)$

$$\psi(p) = \int\frac{dx}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{-ip\cdot x/\hbar}\left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\gamma^2x^2/2}$$

$$= \int\frac{dx}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/4}\exp\left[\left(\frac{p}{\sqrt{2}\hbar\gamma} - \frac{i\gamma x}{\sqrt{2}}\right)^2\right]\exp\left(-\frac{p^2}{2\hbar^2\gamma^2}\right)$$

$$= \left(\frac{1}{\hbar^2\gamma^2\pi}\right)^{1/4}e^{-p^2}/2\hbar^2\gamma^2.$$

1042

Trong không gian một chiều, một hạt có khối lượng m ở trạng thái cơ bản trong một hố thế giới hạn hạt ở một vùng không gian hẹp. Tại thời điểm $t = 0$, thế năng đột ngột biến mất sao cho hạt trở nên tự do ở thời điểm $t > 0$. Hãy cho biết xác suất tính trên một đơn vị thời gian để hạt đến vị trí người quan sát ở cách nó một khoảng L tại thời điểm t.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Giả sử $\psi_0(x)$ là hàm sóng tại thời điểm $t = 0$. Vậy thì

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \left\langle x \middle| \exp\left(\frac{-ip^2t}{2m\hbar}\right) \middle| \psi_0(x) \right\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | e^{-ip^2t/(2m\hbar)} | x' \rangle \, dx' \, \langle x' | \psi_0 \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | e^{-ip^2t/(2m\hbar)} | x' \rangle \, \psi_0(x') \, dx' ,
\end{aligned}$$

ở đây

$$\begin{aligned}
&\left\langle x \middle| \exp\left(-i\,\frac{p^2t}{2m\hbar}\right) \middle| x' \right\rangle \\
&= \int\int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | p' \rangle \, dp' \left\langle p' \middle| \exp\left(-i\,\frac{p^2t}{2m\hbar}\right) \middle| p \right\rangle dp \, \langle p | x' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left[i\,\frac{px}{\hbar} - i\,\frac{px'}{\hbar} - i\,\frac{p^2t}{2m\hbar}\right] dp \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{ -i \left[p\sqrt{\frac{t}{2m\hbar}} \right.\right. \\
&\qquad \left.\left. + \frac{(x' - x)\sqrt{m}}{\sqrt{2\hbar t}} \right]^2 \right\} dp \cdot \exp\left[i(x' - x)^2 \,\frac{m}{2\hbar t}\right] \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m\hbar}{t}} \exp\left[i(x' - x)^2 \,\frac{m}{2\hbar t}\right] \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iq^2} \, dq \\
&= \frac{1 - i}{2} \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar t}} \exp\left[i(x' - x)^2 \,\frac{m}{2\hbar t}\right] .
\end{aligned}$$

Như vậy

$$\psi(x,\,t) = \frac{1-i}{2}\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar t}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[i(x'-x)^2\,\frac{m}{2\hbar t}\right]\cdot\psi_0(x')\,dx'\,.$$

Mô tả hạt này như một bó sóng Gauss kích thước a

$$\psi_0(x) = (\pi a^2)^{-1/4}\exp\left(-x^2/2a^2\right).$$

Tích phân ở trên trở thành

$$\begin{aligned}\psi(x,\,t) &= \frac{(1-i)}{2}\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar t}}\,\frac{1}{\pi^{1/4}a^{1/2}}\\ &\quad\times\exp\left\{i\,\frac{mx^2}{2\hbar t}\left[1-\frac{m}{2\hbar t\left(\frac{m}{2\hbar t}+\frac{i}{2a^2}\right)}\right]\right\}\\ &\quad\times\frac{1}{\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}+\frac{i}{2a^2}}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\xi^2}\,d\xi\\ &= \frac{1}{a^{1/2}\pi^{1/4}}\sqrt{\frac{m}{m+i\,\frac{\hbar t}{a^2}}}\exp\left[-\frac{mx^2}{2a^2}\,\frac{1}{m+i\,\frac{\hbar t}{a^2}}\right],\end{aligned}$$

Suy ra mật độ dòng

$$\begin{aligned}j = Re\left(\psi^*\,\frac{p_x}{m}\,\psi\right) &= \frac{\hbar^2xt}{\sqrt{\pi}a^5m^2}\,\frac{1}{\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^4}\right)^{3/2}}\\ &\quad\times\exp\left[-\frac{x^2}{a^2}\,\frac{1}{1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}\right].\end{aligned}$$

Bằng cách đặt $x = L$, ta thu được xác suất trên một đơn vị thời gian để hạt đến người quan sát ở khoảng cách L.

1043

Một hạt tự do có khối lượng m chuyển động một chiều. Hàm sóng ban đầu của hạt là $\psi(x,\,0)$.

(a) Hãy chỉ ra rằng sau một thời gian t đủ dài hàm sóng của hạt lan rộng để đạt tới dạng giới hạn duy nhất được biểu diễn bởi

$$\psi(x, t) = \sqrt{m/\hbar t}\, \exp(-i\pi/4)\, \exp(imx^2/2\hbar t)\, \varphi(mx/\hbar t)\,,$$

ở đây φ là ảnh Fourier của hàm sóng ban đầu

$$\varphi(k) = (2\pi)^{-1/2} \int \psi(x, 0) \exp(-ikx)\, dx\,.$$

(b) Đưa ra một lời giải thích hợp lý có tính vật lý về giá trị giới hạn của $|\psi(x, t)|^2$.

Gợi ý: Chú ý rằng khi $\alpha \to \infty$,

$$\exp(-i\alpha u^2) \to \sqrt{\pi/\alpha}\, \exp(-i\pi/4)\, \delta(u)\,.$$

(*Columbia*)

Lời giải:

(a) Phương trình Schrödinger là

$$[i\hbar\partial/\partial t + (\hbar^2/2m)\, d^2/dx^2]\, \psi(x, t) = 0\,.$$

Dùng phép biến đổi Fourier, ta có thể viết

$$\psi(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx}\, \psi(x, t)\,,$$

và phương trình trở thành

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \psi(k, t) = 0\,.$$

Lấy tích phân dẫn đến

$$\psi(k, t) = \psi(k, 0)\, \exp\left(-i \frac{k^2 \hbar t}{2m}\right),$$

ở đây

$$\psi(k, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx}\, \psi(x, 0) \equiv \varphi(k)\,.$$

Như vậy

$$\psi(k, t) = \varphi(k)\, \exp\left(-i \frac{k^2 \hbar t}{2m}\right),$$

suy ra

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx}\psi(k,t)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\varphi(k)\exp\left(ikx - i\frac{k^2\hbar t}{2m}\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(i\frac{mx^2}{2\hbar t}\right)\int_{-\infty}^{\infty} dk\\ &\quad\times\exp\left[-i\frac{\hbar t}{2m}\left(k-\frac{mx}{\hbar t}\right)^2\right]\varphi(k).\end{aligned}$$

Với $\xi = k - mx/\hbar t$, phương trình trên trở thành

$$\begin{aligned}\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(i\frac{mx^2}{2\hbar t}\right)\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\\ \times\exp\left(-i\frac{\hbar t}{2m}\xi^2\right)\varphi\left(\xi+\frac{mx}{\hbar t}\right).\end{aligned}$$

Với $\alpha\to\infty$,

$$e^{-i\alpha u^2}\to\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right)\delta(u),$$

và khi sau một thời gian dài t $(t\to\infty)$,

$$\exp\left(-i\frac{\hbar t}{2m}\xi^2\right)\to\sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar t}}\delta(\xi)\exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right),$$

và

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(i\frac{mx^2}{2\hbar t}\right)\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar t}}\\ &\quad\times\delta(\xi)\varphi\left(\xi+\frac{mx}{\hbar t}\right)\exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(i\frac{mx^2}{2\hbar t}\right)\sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar t}}\exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right)\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\\ &= \sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right)\exp\left(i\frac{mx^2}{2\hbar t}\right)\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right).\end{aligned}$$

(b)

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{m}{\hbar t}\left|\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\right|^2.$$

Do $\varphi(k)$ là ảnh Fourier của $\psi(x, 0)$, ta có

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(k)|^2\, dk = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2\, dx .$$

Mặt khác, ta có

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{m}{\hbar t} \left|\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\right|^2 dx$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(k)|^2\, dk = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2\, dx ,$$

cho thấy sự bảo toàn xác suất toàn phần. Đối với trường hợp giới hạn $t \to \infty$, ta có

$$|\psi(x, t)|^2 \to 0 \cdot |\varphi(0)|^2 = 0 ,$$

chỉ ra rằng hàm sóng của hạt sẽ lan rộng ra vô hạn.

1044

Thế năng cơ học lượng tử một chiều của một hạt khối lượng m được cho bởi

$$V(x) = V_0 \delta(x), \quad -a < x < \infty,$$
$$V(x) = \infty, \qquad x < -a ,$$

như chỉ ra trên Hình 1.19. Tại thời điểm $t = 0$, hàm sóng của hạt hoàn toàn bị giới hạn trong vùng $-a < x < 0$. [Định nghĩa các đại lượng $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ và $\alpha = 2mV_0/\hbar^2$]

(a) Hãy viết hàm sóng có năng lượng thấp nhất được chuẩn hóa của hạt tại thời điểm $t = 0$.

(b) Cho biết điều kiện biên mà các hàm riêng năng lượng

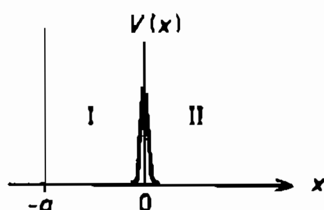
$$\psi_k(x) = \psi_k^{\rm I}(x) \quad \text{và} \quad \psi_k(x) = \psi_k^{\rm II}(x)$$

phải thỏa mãn, ở đây vùng I là $-a < x < 0$ và vùng II là $x \geq 0$.

(c) Tìm các nghiệm (thực) cho các hàm riêng năng lượng trong hai vùng (tới một hằng số chung) thỏa mãn các điều kiện biên.

(d) Hàm sóng tại $t = 0$ có thể được biểu diễn như một tích phân theo các hàm riêng năng lượng

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(k)\, \psi_k(x)\, dk .$$



Hình 1.19

hãy cho biết $f(k)$ có thể được xác định như thế nào từ các nghiệm $\psi_k(x)$?

(e) Cho biết biểu thức của sự biến đổi của hàm sóng theo thời gian theo $f(k)$. Các giá trị nào của k sẽ quyết định đến hành vi theo thời gian ở các thời gian lớn?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Hàm sóng cần thiết $\psi(x)$ phải thỏa mãn các điều kiện biên $\psi(-a) = \psi(0) = 0$. Một tập trực giao đầy đủ của các hàm sóng được xác định trong khoảng $a < x < 0$ và thỏa mãn phương trình Schrödinger bao gồm

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right), & -a < x < 0, \\ 0, & \text{bên ngoài } [-a, 0], \end{cases}$$

ở đây $n = 1, 2, \ldots$ với

$$\langle \phi_n | H | \phi_m \rangle = E_n \delta_{mn}, \quad E_n = (\hbar^2/2m)(n\pi/a)^2 .$$

Hàm sóng năng lượng thấp nhất được chuẩn hóa ứng với $n = 1$ là

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin\left(\dfrac{\pi x}{a}\right), & -a < x < 0, \\ 0, & \text{bên ngoài } [-a, 0] . \end{cases}$$

(b) Phương trình Schrödinger cho $x > -a$ là

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V_0 \delta(x) \psi = E\psi ,$$

hay

$$\psi''(x) + k^2 \psi(x) = \alpha \delta(x) \psi(x)$$

với

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \alpha = \frac{2mV_0}{\hbar^2}.$$

Các điều kiện biên và điều kiện gián đoạn cần phải được thỏa mãn là

$$\psi^{\text{I}}(-a) = 0, \quad \psi^{\text{I}}(0) = \psi^{\text{II}}(0), \quad \psi^{\text{II}}(+\infty) = \text{hữu hạn},$$

$$\psi^{\text{II}'}(0) - \psi^{\text{I}'}(0) = \alpha\psi^{\text{I}}(0).$$

Phương trình cuối cùng thu được bằng cách lấy tích phân phương trình Schrödinger trên một đoạn nhỏ $[-\varepsilon, \varepsilon]$ và cho $\varepsilon \to 0$ (xem **Bài tập 1020**).

(c) Trong cả hai vùng I và II, phương trình sóng là

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0,$$

có các nghiệm thực là các hàm sin. Các nghiệm thỏa mãn các điều kiện biên là

$$\psi_k(x) = \begin{cases} \psi_k^{\text{I}}(x) = c_k \sin k(x+a), & -a < x < 0, \\ \psi_k^{\text{II}}(x) = c_k \sin k(x+a) + A_k \sin kx, & x \geq 0, \\ 0, & x < -a. \end{cases}$$

Từ các điều kiện chuẩn hóa và gián đoạn suy ra

$$A_k = \frac{c_k\alpha}{k} \sin ka,$$

$$c_k = \left\{ \frac{\pi}{2} \left[1 + \frac{\alpha \sin 2ka}{k} + \left(\frac{\alpha \sin ka}{k} \right)^2 \right] \right\}^{-\frac{1}{2}}.$$

(d) Khai triển hàm sóng $\psi(x)$ theo các hàm $\psi_k(x)$,

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(k)\psi_k(x)\, dk,$$

ta thu được

$$\int_{-a}^{\infty} \psi_{k'}^*(x)\psi(x)\, dx = \int\int f(k)\psi_k(x)\psi_{k'}^*(x)\, dkdx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f(k)\delta(k-k')\, dk = f(k'),$$

hay

$$f(k) = \int_{-a}^{\infty} \psi_k^*(x)\,\psi(x)\,dx\,.$$

(e) Do

$$\psi(x,\,0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(k)\,\psi_k(x)\,dk\,,$$

ta có

$$\psi(x,\,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(k)\,\psi_k(x)\,e^{-iE_k t/\hbar}\,dk\,.$$

Tại thời điểm $t = 0$, hạt ở trạng thái cơ bản của một hố thế vuông góc sâu vô hạn có độ rộng a, nó có dạng bó sóng. Khi $t > 0$, do hàng rào thế năng $\delta(x)$ có thể đi xuyên qua được, bó sóng sẽ trải rộng trên cả vùng $x > 0$. Về mặt định lượng, trước hết ta tính

$$\begin{aligned} f(k) &= \int_{-a}^{0} c_k \sin k(x+a)\cdot\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\,dx \\ &= \sqrt{\frac{1}{2a}}\int_{-a}^{0} c_k\left\{\cos\left[\left(k-\frac{\pi}{a}\right)x+ka\right]\right. \\ &\qquad \left. -\cos\left[\left(k+\frac{\pi}{a}\right)x+ka\right]\right\}dx \\ &= \frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\,\frac{\sin ka}{k^2-\left(\frac{\pi}{a}\right)^2}\,c_k \end{aligned}$$

rồi sau đó

$$\begin{aligned} \psi(x,\,t) =& \frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\int_{-\infty}^{-\infty} c_k\,\frac{\sin ka}{k^2-\left(\frac{\pi}{a}\right)^2} \\ &\times\left\{\begin{matrix}\sin k(x+a) \\ \sin k(x+a)+\frac{a}{k}\sin ka\sin kx\end{matrix}\right\} e^{-iE_k t/\hbar}\,dk, \end{aligned}$$

ở đây $E_k = \hbar^2k^2/2m$. Ở biểu thức cuối cùng hàng trên và hàng dưới tương ứng với các vùng I và II.

Khi $t \to \infty$, thừa số dao động $\exp(-iE_k t/\hbar)$ thay đổi thậm chí còn nhanh hơn, trong khi các hàm khác trong biểu thức tích phân vẫn biến đổi bình thường ($k = \pi/a$ không phải là một cực điểm). Như vậy, $\psi(x,\,t)$ có xu thế tiến tới không đối với bất kì giá trị cho trước nào của x. Khi t rất lớn, các sóng

thành phần tương ứng với số sóng k nhỏ đóng vai trò chủ đạo. Tại thời điểm đó, hạt thực sự thoát ra khỏi vùng $[-a, 0]$.

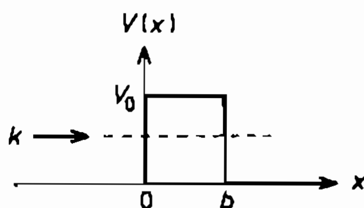
1045

Đồng vị phóng xạ $_{83}Bi^{212}$ phân rã thành $_{81}Tl^{208}$ bằng cách phát ra hạt α có năng lượng $E = 6,0$ MeV.

(a) Để tính được thời gian sống, trước hết ta xét rào thế hữu hạn vẽ trên Hình 1.20. Hãy tính xác suất chuyển dời T để một hạt khối lượng m đi sang phía trái với năng lượng E trong giới hạn $T \ll 1$.

(b) Sử dụng kết quả trên, hãy tính toán sơ bộ thời gian sống của hạt nhân Bi^{212}. Hãy chọn các tham số rào thế hợp lý để tính gần đúng thế năng thực của hạt α.

(*CUS*)



Hình 1.20

Lời giải:

(a) Nếu $T \ll 1$, thì sóng tới phản xạ tại $x = 0$ như trong trường hợp hàng rào thế dày vô hạn. Như vậy, ta có

$$\psi(x) = e^{ikx} + (t_1 - 1)\, e^{-ikx}, \quad x < 0,$$
$$\psi(x) = t_1 e^{-k'x}, \qquad 0 < x < b,$$

ở đây t_1 là hệ số biên độ truyền qua và

$$k' = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Tính liên tục của $\psi'(x)$ tại $x = 0$ dẫn đến

$$ik(2 - t_1) = -k't_1, \quad \text{hay} \quad t_1 = \frac{2k}{k + ik'}.$$

Xét phản xạ tại b. Ta có

$$\psi(x) = t_1 e^{-k'b}\left[e^{-k'(x-b)} + (t_2 - 1)\, e^{k'(x-b)}\right], \quad 0 < x < b,$$
$$\psi(x) = t_1 t_2\, e^{-k'b}\, e^{ik(x-b)}, \quad x > b,$$

và như vậy

$$-k'(2 - t_2) = ikt_2, \quad \text{hay} \quad t_2 = 2ik'/(k + ik')\,.$$

Như vậy, xác suất chuyển dời được tính bởi

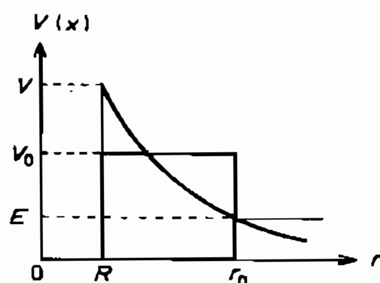
$$T = t_1 t_2\, e^{-k'b}$$

bằng

$$|T|^2 = \frac{16k^2k'^2}{(k^2 + k'^2)^2}\, e^{-2k'b} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2}\, e^{-2k'b}\,.$$

(b) Để đánh giá tốc độ phân rã α của $_{83}\mathrm{Bi}^{212}$, ta xét trong gần đúng bậc nhất thế Coulomb tác dụng lên hạt α trong hạt nhân $_{81}\mathrm{Tl}$ có dạng rào thế hình chữ nhật. Như chỉ ra trên Hình 1.21, bề rộng của rào thế r_0 có thể được lấy bằng

$$r_0 = \frac{2Ze^2}{E} = \frac{2(83-2)}{6}\,\frac{e^2}{\hbar c}\,\frac{\hbar c}{\mathrm{MeV}}$$
$$= \frac{162}{6} \times \frac{1}{137} \times 6,58 \times 10^{-22} \times 3 \times 10^{10}$$
$$= 3,9 \times 10^{-12}\ \mathrm{cm}\,.$$



Hình 1.21

Bán kính của các hạt nhân Tl là

$$R = 1 \times 10^{-13} \times 208^{\frac{1}{3}} = 6 \times 10^{-13}\ \mathrm{cm}\,,$$

Tương ứng với độ cao thế Coulomb bằng

$$V = \frac{2Ze^2}{r_0} \cdot \frac{r_0}{R} = 39 \text{ MeV}.$$

Một hạt α, chuyển động với vận tốc v trong các hạt nhân Tl, gây ra $\frac{v}{2R}$ số va chạm trong một giây với các thành hố thế. Như vậy, thời gian sống τ của $_{83}Bi^{212}$ được tính bởi

$$\tau |T|^2 \frac{v}{2R} \approx 1,$$

hay

$$\tau \simeq \frac{2R}{v|T|^2}.$$

Lấy độ cao của hàng rào thế chữ nhật là $V_0 \approx \frac{1}{2}(39-6)+6 = 22,5$ MeV, $b = r_0 - R = 33 \times 10^{-13}$ cm (xem Hình 1.21), $v = \sqrt{\frac{2E}{m}} = \sqrt{\frac{2\times 6}{940}}\, c \approx 0,1c$, ta tìm được

$$2k'b = \frac{2\sqrt{2mc^2(V_0 - E)}}{\hbar c} \quad b = \frac{2\sqrt{2 \times 940 \times 16,5} \times 33 \times 10^{-13}}{6,58 \times 10^{-22} \times 3 \times 10^{10}} = 59,$$

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{2 \times 6 \times 10^{-13}}{3 \times 10^9} \times \frac{22,5^2}{16 \times 6 \times (22,5 - 6)} \times e^{59} \\ &= 5,4 \times 10^3 \text{ s}. \end{aligned}$$

1046

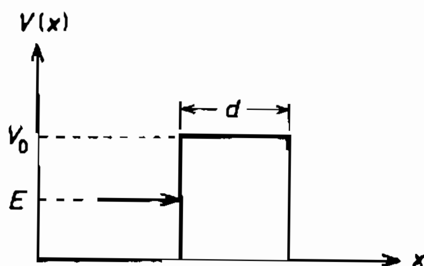
Một electron với năng lượng $E = 1eV$ đi đến một rào thế chữ nhật có thế năng $V_0 = 2$ eV (xem Hình 1.22). Hàng rào thế phải rộng bao nhiêu thì xác suất để electron truyền qua bờ thế đó là 10^{-3}?

(Wisconsin)

Lời giải:

Xác suất truyền qua là (Bài tập 1045)

$$\begin{aligned} T &\simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \cdot \exp\left[-\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right] \\ &= 4 \exp\left[-\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right], \end{aligned}$$



Hình 1.22

khi đó

$$d = -\frac{\ln\left(\frac{T}{4}\right)}{2}\frac{\hbar c}{\sqrt{2mc^2(V_0-E)}}$$

$$= -\frac{\ln\left(\frac{10^{-3}}{4}\right)}{2} \times \frac{6,58 \times 10^{-16} \times 3 \times 10^{10}}{\sqrt{2 \times 0,51 \times 10^6}} = 8,1 \times 10^{-8}\text{cm}\,.$$

1047

Xét một hố thế một chiều (xem Hình 1.23)

$$V(x) = 0, \qquad x < 0,$$
$$V(x) = -V_0, \quad 0 < x < a,$$
$$V(x) = 0, \qquad x > a,$$

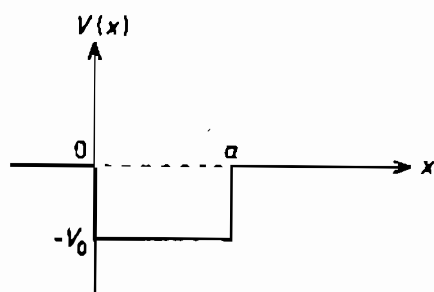
ở đây V_0 dương. Nếu một hạt khối lượng m đi tới từ bên trái với động năng phi tương đối tính E thì xác suất truyền qua hố thế bằng bao nhiêu? Với các giá trị nào của E thì xác suất đó sẽ bằng đơn vị?

(Columbia)

Lời giải:

Viết hàm sóng dưới dạng

$$\psi(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}, \qquad x < 0,$$
$$\psi(x) = Se^{ikx}, \qquad x > a,$$
$$\psi(x) = Ae^{ik'x} + Be^{-ik'x}, \quad 0 < x < a,$$



Hình 1.23

ở đây

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k' = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}.$$

Các hằng số R, S, A, B được xác định từ các điều kiện biên để cả $\psi(x)$ và $\psi'(x)$ liên tục tại $x = 0$ và $x = a$, và điều đó dẫn tới

$$\begin{cases} 1 + R = A + B, \\ k(1 - R) = k'(A - B), \\ Ae^{ik'a} + Be^{-ik'a} = Se^{ika}, \\ k'(Ae^{ik'a} - Be^{-ik'a}) = kSe^{ika}. \end{cases}$$

Suy ra

$$S = \frac{4kk'e^{-ika}}{(k+k')^2\, e^{-ik'a} - (k-k')^2\, e^{ik'a}}$$

và xác suất truyền qua là

$$P = \frac{j_t}{j_i} = |S|^2$$

$$= \frac{4k^2k'^2}{4(kk' \cos k'a)^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a)}.$$

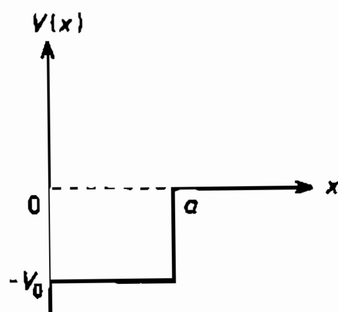
Sự truyền qua cộng hưởng xảy ra khi $k'a = n\pi$, tức là động năng E của hạt đi tới là

$$E = n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2 - V_0.$$

Xác suất truyền qua P lúc đó sẽ bằng đơn vị.

1048

Xét một hố thế một chiều (xem Hình 1.24):



Hình 1.24

$$V(x) = \infty, \quad x < 0,$$
$$V(x) = -V_0, \quad 0 < x < a,$$
$$V(x) = 0, \quad x > a.$$

(a) Với $E < 0$, hãy tìm hàm sóng của một hạt bị giam giữ trong hố thế này. Viết một phương trình xác định các giá trị cho phép của E.

(b) Giả thiết một hạt với năng lượng $E > 0$ đi vào hố thế này. Tìm mối liên hệ về pha giữa sóng tới và sóng đi ra.

(Columbia)

Lời giải:

Phương trình Schrödinger viết cho các miền khác nhau là

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - V_0 - E\right]\psi(x) = 0, \quad 0 < x < a,$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - E\right]\psi(x) = 0, \quad x > a.$$

(a) $E < 0$.

(i) Trước hết xét trường hợp $V_0 < -E$, tương ứng với hàm sóng là

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ A \sinh(kx), & 0 < x < a, \\ Be^{-k'x}, & x > a, \end{cases}$$

ở đây

$$k = \sqrt{\frac{2m(-V_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad k' = \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}}.$$

Các điều kiện liên tục của hàm sóng dẫn đến

$$A \sinh(ka) = Be^{-k'a},$$

$$Ak \cosh(ka) = -Bk'e^{-k'a}$$

suy ra

$$k \coth(ka) = -k'.$$

Do coth $x > 0$ với $x > 0$, nên không tồn tại nghiệm trong trường hợp này.

(ii) Với $V_0 > -E$, $ik \to k$, $k = \sqrt{2m(V_0 + E)}/\hbar$, và phương trình xác định năng lượng trở thành $k \cot(ka) = -k'$. Hàm sóng là

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ A \sin(kx), & 0 < x < a, \\ Be^{-k'x}, & x > a. \end{cases}$$

Từ các điều kiện chuẩn hóa và liên tục của hàm hàm sóng ta có

$$A = \left[\frac{2}{\frac{1}{k'} \sin^2(ka) + a - \frac{1}{2k} \sin(2ka)}\right]^{1/2},$$

$$B = \left[\frac{2}{\frac{1}{k'} \sin^2(ka) + a - \frac{1}{2k} \sin(2ka)}\right]^{1/2} e^{k'a} \sin(ka).$$

(b) $E > 0$. Hàm sóng là

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ A \sin(kx), & 0 < x < a, \\ B \sin(k'x + \varphi), & x > a, \end{cases}$$

ở đây

$$k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}, \quad k' = \sqrt{2mE/\hbar^2}.$$

Do $\partial \ln\psi/\partial \ln x$ liên tục tại $x = a$, ta có

$$(ka)\cot(ka) = (k'a)\cot(k'a + \varphi),$$

khi đó

$$\varphi = \text{arccot}\left(\frac{k}{k'}\cot(ka)\right) - k'a.$$

Đối với $x > a$,

$$\psi(x) = \frac{B}{2i}e^{-ik'x - i\varphi} - \frac{B}{2i}e^{ik'x + i\varphi},$$

trong đó

$$\varphi_{\text{tới}}(x) \propto e^{-ik'x - i\varphi},$$

$$\varphi_{\text{đi ra}}(x) \propto e^{ik'x + i\varphi}.$$

Như vậy, sự dịch pha của sóng đi ra so với sóng tới là

$$\delta = 2\varphi = 2\left[\text{arccot}\left(\frac{k}{k'}\cot(ka)\right) - k'a\right].$$

1049

Xét một hệ một chiều với thế năng (xem Hình 1.25)

$$V(x) = V_0, \quad x > 0,$$
$$V(x) = 0, \quad x < 0,$$

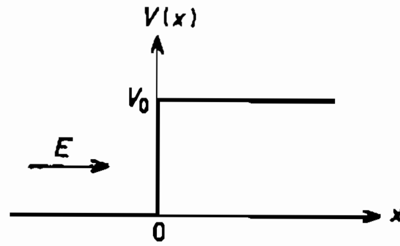
ở đây V_0 là một hằng số dương. Nếu một chùm hạt có năng lượng E tới từ bên trái (tức là từ $x = -\infty$), phần truyền qua và phần phản xạ của chùm hạt là bao nhiêu? Xét tất các giá trị có thể của E.

(Columbia)

Lời giải:

Đối với $x < 0$, phương trình Schrödinger là

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0,$$



Hình 1.25

Nghiệm của nó có dạng

$$\psi(x) = e^{ikx} + re^{-ikx},$$

ở đây

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\,.$$

Đối với $x > 0$, phương trình là

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi = 0.$$

(i) Nếu $E < V_0$, viết lại phương trình trên dưới dạng

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi = 0.$$

Do $\psi(x)$ phải hữu hạn khi xác định với $x \to \infty$, nên nghiệm có dạng

$$\psi(x) = te^{-k'x},$$

ở đây

$$k' = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}\,.$$

Các điều kiện liên tục dẫn tới

$$1 + r = t,$$
$$ik - ikr = -tk',$$

khi đó $r = (k' + ik)/(ik - k') = (1 - ik'/k)/(1 + ik'/k)$. Do vậy, phần phản xạ là $R = j_{\text{phản xạ}}/j_{\text{tới}} = |r|^2 = 1$, phần truyền qua là $T = 1 - R = 0$.

(ii) $E > V_0$. Với $x > 0$, ta có

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\right] \psi(x) = 0.$$

ở đây

$$\psi(x) = te^{ik'x}, \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}.$$

Chú ý rằng chỉ có các sóng đi ra đối với $x \to \infty$, ta có $1 + r = t$, $ik - ikr = ik't$, và như vậy $r = (k' - k)/(k' + k)$. Do đó, phần bị phản xạ là $R = [(k' - k)/(k' + k)]^2$, còn phần truyền qua là $T = 1 - R = 4kk'/(k + k')^2$.

1050

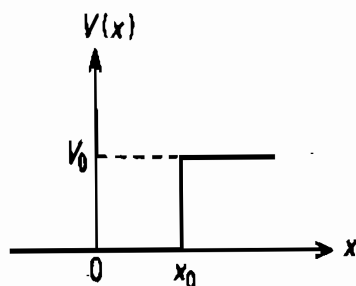
Một hạt có khối lượng m và xung lượng p đi tới từ phía trái của một thế năng nhảy bậc như trên Hình 1.26.

Hãy tính xác suất để hạt bị tán xạ ngược trở lại bởi thế năng đó nếu

(a) $p^2/2m < V_0$,

(b) $p^2/2m > V_0$.

(*Columbia*)



Hình 1.26

Lời giải:

Các phương trình Schrödinger là

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) \psi(x) = 0 \quad \text{với} \quad x < x_0,$$

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\right] \psi(x) = 0 \quad \text{với} \quad x > x_0.$$

(a) Nếu $E < V_0$, ta có

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik(x-x_0)} + re^{-ik(x-x_0)}, & x < x_0, \\ te^{-k'(x-x_0)}, & x > x_0, \end{cases}$$

ở đây

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

$$k' = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}},$$

và điều kiện để $\psi(x)$ là hữu hạn khi $x \to \infty$ đã được sử dụng. Các điều kiện liên tục dẫn tới $1 + r = t$, $ik - ikr = -k't$, khi đó $r = (k' + ik)/(ik - k')$. Xác suất của phản xạ khi đó là $R = j_r/j_i = |r|^2 = 1$.

(b) Nếu $E > V_0$. Ta có

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik(x-x_0)} + re^{-ik(x-x_0)}, & x < x_0, \\ te^{ik'(x-x_0)}, & x > x_0, \end{cases}$$

ở đây

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

$$k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}},$$

Chú ý rằng chỉ có sóng đi ra đối với $x > x_0$. Các điều kiện liên tục dẫn đến $1 + r = t$, $ik - ikr = ik't$, và do đó $r = (k - k')/(k + k')$. Xác suất phản xạ khi đó sẽ bằng $R = |r|^2 = [(k - k')/(k + k')]^2$.

1051

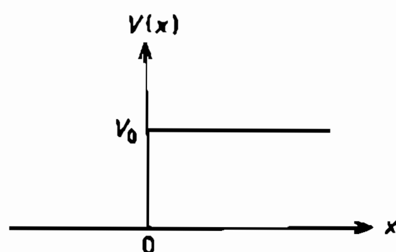
Hãy tìm các hệ số phản xạ và truyền qua đối với một thế nhảy bậc một chiều trên Hình 1.27 nếu các hạt đến từ phía phải.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Do các hạt đến từ phía phải ta phải có $E > V_0$. Và có cả hai sóng tới và sóng phản xạ ở vùng $x > 0$. Phương trình Schrödinger với $x > 0$ là,

$$\psi''(x) + k_1^2\,\psi(x) = 0,$$



Hình 1.27

ở đây $k_1 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$, có các nghiệm dạng

$$\psi = \exp(-ik_1x) + R\, \exp(ik_1x).$$

Chỉ có các sóng truyền qua trong vùng $x < 0$, ở đây phương trình Schrödinger là

$$\psi''(x) + k_2^2\psi(x) = 0$$

với $k_2 = \sqrt{2mE}/\hbar$, và có nghiệm

$$\psi(x) = S\, \exp(-ik_2x).$$

Sử dụng các điều kiện liên tục của hàm sóng tại $x = 0$, ta thu được $1 + R = S$. Từ tính liên tục của đạo hàm bậc nhất của hàm sóng, ta có $k_1(1 - R) = k_2 S$. Như vậy $R = (k_1 - k_2)/(k_1 + k_2)$, dẫn đến hệ số phản xạ là

$$|R|^2 = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2 = \frac{V_0^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^4},$$

và hệ số truyền qua là

$$|S|^2 = 1 - |R|^2 = 1 - \frac{V_0^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^4}.$$

1052

Xét theo quan điểm cơ học lượng tử một dòng các hạt có khối lượng m, mỗi hạt chuyển động theo chiều dương của trục x với động năng E về phía một thế nhảy bậc ở vị trí $x = 0$. Thế bằng không với $x \leq 0$ và bằng $3E/4$ với

$x > 0$. Tỉ phần các hạt bị phản xạ lại tại $x = 0$ là bao nhiêu?

(*Buffalo*)

Lời giải:

Các phương trình Schrödinger là

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \quad \text{với} \quad x \leq 0,$$
$$\psi'' + (k/2)^2\psi = 0 \quad \text{với} \quad x > 0,$$

ở đây $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Vì với $x < 0$ cũng sẽ có các sóng phản xạ nên các nghiệm có dạng

$$\psi = \exp(ikx) + r\exp(-ikx), \quad x \leq 0,$$
$$\psi = t\exp(ikx/2), \quad x > 0.$$

Từ các điều kiện liên tục của hàm sóng tại $x = 0$, ta thu được $1 + r = t$, $k(1 - r) = kt/2$, và như vậy $r = 1/3$. Do vậy, một phần chín số hạt sẽ bị phản xạ tại $x = 0$.

1053

Xét một chùm hạt được coi như là một sóng phẳng truyền theo trục x theo chiều từ trái sang phải và đi tới một rào thế $V(x) = \gamma\delta(x)$, $\gamma > 0, v\delta(x)$ là hàm delta Dirac.

(a) Cho biết dạng hàm sóng với $x < 0$.

(b) Cho biết dạng hàm sóng với $x > 0$.

(c) Nêu các điều kiện mà hàm sóng phải thoả mãn tại biên giữa hai vùng.

(d) Tính xác suất truyền qua.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Với $x < 0$, hàm sóng tới có dạng $\exp(ikx)$ và các sóng phản xạ có dạng $R\exp(-ikx)$. Như vậy

$$\psi(x) = \exp(ikx) + R\exp(-ikx), \quad x < 0.$$

(b) Với $x > 0$, khi đó chỉ tồn tại các sóng truyền qua có dạng $S\exp(ikx)$. Như vậy

$$\psi(x) = S\exp(ikx), \quad x > 0.$$

(c) Phương trình Schrödinger là

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+\gamma\delta(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

và các nghiệm của nó thỏa mãn biểu thức (xem **Bài tập 1020**)

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0).$$

Do hàm sóng liên tục tại $x=0, \psi(0^+)=\psi(0^-)$.

(d) Từ (a), (b) và (c) ta có $1+R=S, ikS-ik(1-R)=2m\gamma S/\hbar^2$, dẫn đến $S=1/(1+im\gamma/\hbar^2 k)$. Do đó, hệ số truyền qua là

$$T=|S|^2=\left(1+\frac{m^2\gamma^2}{\hbar^4 k^2}\right)^{-1}=\left(1+\frac{m\gamma^2}{2E\hbar^2}\right)^{-1},$$

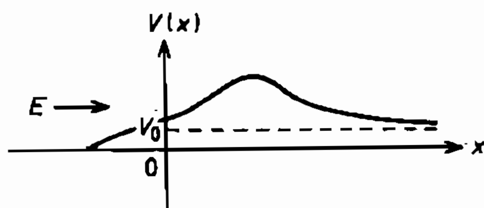
ở đây $E=\hbar^2k^2/2m$.

1054

Xét bài toán một chiều của một hạt có khối lượng m đi tới rào thế có hình dạng như trên Hình 1.28. Giả thiết rằng năng lượng E tại $x\to-\infty$ lớn hơn V_0, ở đây V_0 là giá trị tiệm cận của thế năng khi $x\to\infty$.

Hãy chỉ ra rằng tổng của các cường độ phản xạ và truyền qua chia cho cường độ tới bằng 1.

(*Princeton*)



Hình 1.28

Lời giải:

Do $E>V_0$ ta có thể giả thiết các dạng tiệm cận

$$\psi\to e^{ikx}+re^{-ikx} \quad \text{với} \quad x\to-\infty,$$
$$\psi\to te^{i\beta x} \quad \text{với} \quad x\to+\infty,$$

ở đây r, t, k, β là các hằng số. Cường độ tới được định nghĩa là số hạt đi đến trên một đơn vị thời gian $I = \hbar k/m$. Tương tự như vậy các cường độ phản xạ và truyền qua lần lượt là

$$R = |r|^2\hbar k/m, \quad T = |t|^2\hbar\beta/m.$$

Nhân hai vế của phương trình Schrödinger với ψ^*,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\nabla^2\psi + \psi^* V\psi = E\psi^*\psi,$$

và nhân hai vế của liên hợp phức của phương trình Schrödinger với ψ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2\psi^* + \psi^* V\psi = E\psi^*\psi,$$

và lấy hiệu của hai phương trình ta được

$$\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^* = \nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) = 0.$$

Điều này có nghĩa là

$$f(x) = \psi^* d\psi/dx - \psi d\psi^*/dx$$

là một hằng số. Cho $f(+\infty)$ bằng $f(-\infty)$, ta tìm được

$$k(1 - |r|^2) = \beta|t|^2.$$

Nhân hai vế với $\frac{\hbar}{m}$ dẫn đến

$$I = R + T.$$

1055

Một phương trình Schrödinger trong không gian một chiều được viết dưới dạng

$$(-\partial^2/\partial x^2 - 2\,\text{sech}^2\,x)\,\psi = \varepsilon\psi$$

$(\hbar = 1, m = 1/2)$.

(a) Hãy chỉ ra rằng $\exp(ikx)(\tanh x +$ hằng số$)$ là một nghiệm của phương trình ứng với một giá trị cụ thể của hằng số. Hãy tính ma trận S (các hệ số phản xạ và truyền qua) đối với bài toán này.

(b) Hàm sóng sech x cũng thỏa mãn phương trình Schrödinger trên. Hãy tính năng lượng của trạng thái liên kết tương ứng và đưa ra một lập luận đơn giản cho thấy nó phải là trạng thái cơ bản.

(c) Chỉ ra cách đánh giá năng lượng ở trạng thái cơ bản nếu ta không biết hàm sóng.

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Đặt hằng số trong nghiệm đã cho ψ là K và thế ψ vào phương trình Schrödinger, ta thu được

$$k^2 (\tanh x + K) - 2(ik + K) \operatorname{sech}^2 x = \varepsilon (\tanh x + K).$$

phương trình này được thỏa mãn nếu ta đặt $K = -ik$ và $\varepsilon = k^2$. Như vậy

$$\psi(x) = e^{ikx} (\tanh x - ik)$$

là một nghiệm của phương trình và năng lượng tương ứng là k^2. Khi đó, vì $\tanh x \to 1$ khi $x \to \infty$ và $\tanh(-x) = -\tanh x$ ta có

$$\begin{aligned} \psi &= (1 - ik) e^{ikx} \quad \text{khi} \quad x \to \infty, \\ \psi &= -(1 + ik) e^{ikx} \quad \text{khi} \quad x \to -\infty. \end{aligned}$$

Do $V(x) \leq 0, \varepsilon > 0$, nên hệ số truyền qua là $T = 1$ và hệ số phản xạ là $R = 0$ khi hạt chuyển động qua $V(x)$. Vì vậy, ma trận S là

$$\begin{pmatrix} 1 & -(1 - ik)/(1 + ik) \\ -(1 - ik)/(1 + ik) & 0 \end{pmatrix}.$$

(b) Đặt ψ =sech x vào phương trình Schrödinger ta có $-\psi = \varepsilon\psi$. Do đó, $\varepsilon = -1$. Do sech x là một trạng thái liên kết không có nút trong toàn bộ không gian tọa độ nên nó phải là trạng thái cơ bản.

(c) Ta có thể giả thiết một hàm chẵn liên kết không có nút với một tham số và thu được một giá trị gần đúng của năng lượng cơ bản bằng phương pháp biến phân.

1056

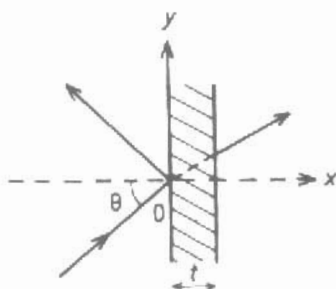
Một chùm hạt nơtron phi tương đối tính có năng lượng E xác định và truyền song song tới bề mặt phẳng của một tấm vật chất có chiều dày t. Trong

vật chất, các nơtron chuyển động trong một trường thế hút đồng nhất V. Chùm tới tạo một góc θ với pháp tuyến của bề mặt như chỉ ra trên Hình 1.29.

(a) Phần tia tới bị phản xạ bằng bao nhiêu nếu t là vô hạn?

(b) Phần tia tới bị phản xạ bằng bao nhiêu nếu V là thế đẩy và $V = E$? Coi t là hữu hạn.

(CUS)



Hình 1.29

Lời giải:

(a) Đặt k_0 là số sóng của một hạt nơtron tới, được tính bởi $k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Với $x < 0$, hàm sóng là

$$\psi_1(x, y) = e^{ik_0 x \cos\theta + ik_0 y \sin\theta} + Re^{-ik_0 x \cos\theta + ik_0 y \sin\theta}.$$

Với t vô hạn và thế âm, với $x > 0$ phương trình Schrödinger là

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = (E + V)\psi.$$

Giả thiết một nghiệm

$$\psi_2(x, y) = Te^{ik_x x + ik_y y}$$

và thế nó vào phương trình, ta thu được $k_x^2 + k_y^2 = 2m(E + V)/\hbar^2$.

Các điều kiện biên tại $x = 0$

$$\psi_1(0, y) = \psi_2(0, y),$$

$$\left.\frac{\partial\psi_1}{\partial x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\right|_{x=0},$$

Do đó, dẫn đến

$$e^{ik_0 y \sin\theta} + Re^{ik_0 y \sin\theta} = Te^{ik_y y},$$

$$ik_0 \cos\theta e^{ik_0 y \sin\theta} - Rik_0 \cos\theta e^{ik_0 y \sin\theta} = Tik_x e^{ik_y y},$$

Do thế năng không biến thiên theo y, $k_y = k_0 \sin\theta$ và các biểu thức trên trở thành

$$1 + R = T,$$

$$k_0(1 - R) \cos\theta = k_x T,$$

dẫn tới $R = (k_0 \cos\theta - k_x)/(k_0 \cos\theta + k_x)$. Xác suất phản xạ là $P = |R|^2 = (k_0 \cos\theta - k_x)^2/(k_0 \cos\theta + k_x)^2$, với $k_x^2 = 2m(E + V)/\hbar^2 - k_0^2 \sin^2\theta$, $k_0^2 = 2mE/\hbar^2$.

(b) Với $x < 0$ hàm sóng có cùng dạng như trong phần (a). Với $0 < x < t$, $E - V = 0$, và phương trình Schrödinger là

$$-(\hbar^2/2m) \nabla^2\psi = 0.$$

Do thế năng đồng nhất theo phương y ta giả thiết $\psi = \exp(ik'y) \exp(kx)$, ở đây $k' = k_0 \sin\theta$. Thế vào phương trình Schrödinger ta được $-k'^2 + k^2 = 0$, hoặc $k = \pm k'$. Như vậy, hàm sóng với $0 < x < t$ là

$$\psi_2(x, y) = (ae^{k'x} + be^{-k'x}) e^{ik'y}.$$

Viết $\psi(x, y) = \phi(x) e^{ik'y}$, ta có ứng với ba vùng

$$x < 0, \quad \phi_1(x) = e^{ik_x x} + re^{-ik_x x},$$

$$0 < x < t, \quad \phi_2(x) = ae^{k'x} + be^{-k'x},$$

$$x > t, \quad \phi_3(x) = ce^{ik_x x},$$

với

$$k_x = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cos\theta, \quad k' = \sqrt{2mE/\hbar^2} \sin\theta.$$

Các điều kiện biên

$$\phi_1(0) = \phi_2(0), \quad \phi_2(t) = \phi_3(t),$$

$$\left.\frac{d\phi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\phi_2}{dx}\right|_{x=0}, \quad \left.\frac{d\phi_2}{dx}\right|_{x=t} = \left.\frac{d\phi_3}{dx}\right|_{x=t}$$

dẫn tới

$$\begin{aligned} 1 + r &= a + b\,, \\ ik_x(1 - r) &= k'(a - b)\,, \\ c\ \exp(ik_x t) &= a\ \exp(k' t) + b\ \exp(-k' t)\,, \\ ik_x c\ \exp(ik_x t) &= k' a\ \exp(k' t) - k' b\ \exp(-k' t)\,, \end{aligned}$$

nghiệm của nó là

$$r = \left[\frac{ik_x}{k'}\left(\frac{a/b + 1}{a/b - 1}\right) - 1\right]\left[\frac{ik_x}{k'}\left(\frac{a/b + 1}{a/b - 1}\right) - 1\right]^{-1}\,,$$

$$a/b = [(k' + ik_x)/(k' - ik_x)] \cdot e^{-2k't}\,.$$

Suy ra

$$r = \frac{e^{2k't} - 1}{1 - \beta^2 e^{2k't}}$$

với

$$\beta = \frac{k' - ik_x}{k' + ik_x}\,,$$

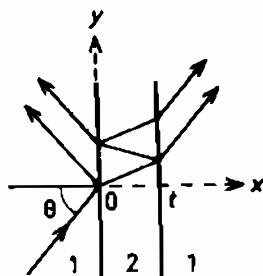
và phần nơtron bị phản xạ lại là

$$|R|^2 = |r|^2 = \frac{e^{2k't} + e^{-2k't} - 2}{e^{2k't} + e^{-2k't} - 2\ \cos 4\theta}\,.$$

Lời giải khác:

Nghiệm cũng có thể thu được bằng cách cộng các biên độ vô hạn tương tự như trong trường hợp giao thoa kế Fabry-Perot trong quang học (xem Hình 1.30).

Ta chỉ cần xét đến thành phần x của các sóng. Kí hiệu T_{12}, R_{12} là các hệ số của biên độ truyền qua và phản xạ khi một sóng đi từ môi trường 1 đến môi trường 2. Kí hiệu T_{21}, R_{21} là các hệ số biên độ truyền qua và phản xạ từ môi trường 2 đến môi trường 1. Lấy biên độ của sóng tới là 1. Vậy thì biên độ của



Hình 1.30

sóng truyền tới môi trường 2 là tổng

$$\begin{aligned} T &= T_{12}e^{-\delta} \cdot T_{21} + T_{12}e^{-\delta} \cdot R_{21}e^{-2\delta}R_{21} \cdot T_{21} \\ &\quad + T_{12}e^{-\delta} \cdot (R_{21}e^{-2\delta}R_{21})^2 \cdot T_{21} + \cdots \\ &= T_{12}e^{-\delta}T_{21}\left[1 + R_{21}^2\, e^{-2\delta} + (R_{21}^2 e^{-2\delta})^2 + \cdots\right] \\ &= T_{12}T_{21}e^{-\delta}\frac{1}{1 - R_{21}^2 e^{-2\delta}}. \end{aligned}$$

Trong biểu thức trên $\exp(-\delta)$ là hệ số tắt dần của sóng trong môi trường 2, ở đây

$$\delta = k't \quad \text{với} \quad k' = \sqrt{2mE(1-\cos^2\theta)}/\hbar = \sqrt{2mE}\,\sin\theta/\hbar.$$

Từ (a) ta có các hệ số truyền qua và phản xạ là

$$R_{12} = (k_{1x} - k_{2x})/(k_{1x} + k_{2x}),$$

$$T_{12} = 1 + R_{12} = 2k_1/(k_{1x} + k_{2x}).$$

Do

$$k_{1x} = \sqrt{2mE}\,\cos\theta/\hbar,$$

$$k_{2x} = ik' = i\sqrt{2mE}\,\sin\theta/\hbar,$$

ta tìm được

$$T_{12} = 2k_{1x}/(k_{1x} + k_{2x}) = \frac{2\cos\theta}{\cos\theta + i\sin\theta} = 2\cos\theta e^{-i\theta},$$

$$T_{21} = 2k_{2x}/(k_{1x} + k_{2x}) = \frac{2i\sin\theta}{\cos\theta + i\sin\theta} = 2i\sin\theta e^{-i\theta},$$

$$R_{21} = (k_{2x} - k_{1x})/(k_{1x} + k_{2x}) = \frac{i\sin\theta - \cos\theta}{i\sin\theta + \cos\theta} = e^{-2i\theta},$$

và do đó

$$T = T_{12}T_{21}e^{-\delta}\frac{1}{1-R_{21}^2e^{-2\delta}}$$

$$= \frac{4i\cos\theta\sin\theta e^{-2i\theta}\cdot e^{-k't}}{1-e^{-4i\theta}e^{-2k't}}$$

$$= \frac{2i\sin 2\theta\, e^{-2i\theta}e^{-k't}}{1-e^{-4i\theta}e^{-2k't}}.$$

Độ truyền qua khi đó là

$$|T|^2 = \frac{4\sin^2 2\theta e^{-2k't}}{(1-e^{-2k't}\cos^4\theta)^2+(e^{-2k't}\sin 4\theta)^2}$$

$$= \frac{4\sin^2 2\theta e^{-2k't}}{1+e^{-4k't}-2e^{-2k't}\cos 4\theta}$$

$$= \frac{4\sin^2 2\theta}{e^{2k't}+e^{-2k't}-2\cos 4\theta},$$

và độ phản xạ là

$$1-|T|^2 = 1-\frac{4\sin^2 2\theta}{e^{2k't}+e^{-2k't}-2\cos 4\theta}$$

$$= \frac{e^{2k't}+e^{-2k't}-2}{e^{2k't}+e^{-2k't}-2\cos 4\theta},$$

ở đây $k' = \sqrt{2mE}\sin\theta/\hbar$.

1057

Hãy tìm hàm sóng mô tả một hạt chuyển động một chiều trong một trường thế ảo không đổi $-iV$ ở đây $V \ll E$.

Tính dòng xác suất và chỉ ra rằng một trường thế ảo biểu thị sự hấp thụ của các hạt. Tìm một biểu thức tính hệ số hấp thụ theo V.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Phương trình Schrödinger là

$$i\hbar\partial\psi/\partial t = (\hat{p}^2/2m - iV)\,\psi.$$

Giả thiết $\psi = \exp(-iEt/\hbar)\,\exp(ikx)$, ta có $k^2 = (2mE/\hbar^2)(1 + iV/E)$. Do $V \ll E$,

$$k \approx \pm\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\left(1 + i\frac{V}{2E}\right),$$

và như vậy

$$\psi_{\pm}(x, t) = \exp\left(\mp\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\frac{V}{2E}x\right)\cdot\exp\left(\pm i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x\right)\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right),$$

ở đây ψ_+ và ψ_- lần lượt là các sóng truyền sang phải và sang trái đều suy giảm theo hàm mũ. Dòng xác suất là

$$j = Re\left(\psi^*\frac{\hat{p}}{m}\psi\right) = Re\left(\psi^*\frac{\hbar k}{m}\psi\right) = Re\left[\frac{\hbar k}{m}\exp\left(\mp\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\frac{V}{E}x\right)\right]$$

$$\approx \pm\frac{\hbar}{m}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\exp\left(\mp\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\frac{V}{E}x\right).$$

Đây là các dòng suy giảm theo hàm e mũ theo các hướng tương ứng. Hệ số hấp thụ như vậy sẽ bằng

$$\mu = \left|-\frac{1}{j}\frac{dj}{dx}\right| = \left|-\frac{d\ln j}{dx}\right| = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\frac{V}{E}.$$

Thế ảo iV biểu thị sự hấp thụ của hạt vì e mũ của j cũng là một số ảo. Như vậy, sẽ không có sự hấp thụ nếu V là thực.

1058

Nghiệm của phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian đối với hạt tự do trong không gian một chiều có bước sóng xác định λ là $\psi(x, t)$ được quan sát bởi một người O trong một hệ quy chiếu gắn với hệ tọa độ (x, t). Bây giờ xét hạt đó khi được mô tả bởi hàm sóng $\psi'(x', t')$ theo người quan sát O' gắn với hệ tọa độ (x', t') liên hệ với (x, t) qua phép biến đổi Galilê

$$x' = x - vt,$$

$$t' = t.$$

(a) $\psi(x, t)$, $\psi'(x', t')$ có mô tả các sóng có cùng bước sóng hay không?

(b) Mối liên hệ giữa $\psi(x, t)$ và $\psi'(x', t')$ như thế nào nếu cả hai thỏa mãn phương trình Schrödinger trong các hệ tọa độ tương ứng của chúng?

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian trong không gian một chiều đối với một hạt tự do

$$i\hbar\partial_t\psi(x, t) = (-\hbar^2/2m)\,\partial_x^2\psi(x, t)$$

có một nghiệm tương ứng với một bước sóng λ xác định

$$\psi_\lambda(x, t) = \exp[i(kx - \omega t)]$$

với

$$\lambda = 2\pi/k = 2\pi\hbar/p, \quad \omega = \hbar k^2/2m.$$

Do xung lượng p của hạt khác nhau khi ở hai hệ quy chiếu khác nhau do đó bước sóng λ của chúng cũng khác nhau.

(b) Áp dụng phép biến đổi Galilê và sử dụng phương trình Schrödinger trong hệ quy chiếu (x', t') ta tìm được

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi'(x', t') &= i\hbar\partial_t\psi'(x - vt, t) \\ &= i\hbar\left[\partial_t'\psi'(x', t') - v\partial_x'\psi'(x', t')\right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\,\partial_x'^2\psi'(x', t') - i\hbar v\partial_x'\psi'(x', t') \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\,\partial_x^2\psi'(x - vt, t) - i\hbar v\partial_x\psi'(x - vt, t). \end{aligned} \tag{1}$$

Xét

$$\begin{aligned} &i\hbar\,\partial_t\left[e^{i(kx-\omega t)}\psi'(x', t')\right] \\ &\quad = i\hbar e^{i(kx-\omega t)}\left(\partial_t\psi' - i\omega\psi'\right) \end{aligned}$$

và

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar^2}{2m}\,\partial_x^2\left[e^{i(kx-\omega t)}\psi'(x', t')\right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\,e^{i(kx-\omega t)}\left(-k^2\psi' + 2ik\,\partial_x\psi' + \partial_x^2\psi'\right) \\ &= i\hbar\,e^{i(kx-\omega t)}\left(\partial_t\psi' - i\omega\psi'\right), \end{aligned}$$

Sử dụng (1) và các định nghĩa của k và ω, ta thấy rằng

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\left[e^{imvx/\hbar}e^{-imv^2t/2\hbar}\psi'(x-vt,\,t)\right]$$
$$=i\hbar\partial_t\left[e^{imvx/\hbar}e^{-imv^2t/2\hbar}\psi'(x-vt,\,t)\right].$$

Đây chính là phương trình Schrödinger mà hàm $\psi(x,\,t)$ thỏa mãn. Như vậy, ta có hệ thức chính xác tới một thừa số pha

$$\psi(x,\,t)=\psi'(x-vt,\,t)\,\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[mvx-\frac{mv^2}{2}t\right]\right\}.$$

1059

Một hạt có khối lượng m bị giam giữ trong một thế dao động tử điều hòa có tần số ω và ở trạng cơ bản nó chịu một lực đẩy $p\delta(t)$.

Tìm xác suất để hạt vẫn nằm ở trạng thái cơ bản.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Hạt nhận một xung lượng tức thời p tại thời điểm $t=0$ và vận tốc của nó thay đổi tức thời thành p/m. Tuy nhiên, độ kéo dài của xung lực quá ngắn để làm thay đổi hàm sóng. Như vậy, trong hệ quy chiếu K' chuyển động theo hạt thì hạt vẫn ở trạng thái cơ bản của dao động tử điều hòa $\psi_0(x')$. Nhưng đối với hệ quy chiếu đứng yên K, hạt ở trạng thái $\psi_0(x')\,\exp(-ipx/\hbar)$. Ta có thể giả thiết một cách hợp lý rằng vị trí của hạt là không đổi trong toàn bộ quá trình và đến khi kết thúc tác dụng của lực đẩy tọa độ của hạt là như nhau cho cả hai hệ quy chiếu K và K'. Như vậy, hàm sóng ban đầu tại K là

$$\psi_0'=\psi_0(x)\,\exp(-ipx/\hbar).$$

Do đó, xác suất để hạt vẫn nằm ở trạng thái cơ bản sau tác dụng lực đẩy là

$$P_0=\left|\langle\psi_0|\,\exp\left(-i\frac{px}{\hbar}\right)|\psi_0\rangle\right|^2=\frac{\alpha^2}{\pi}\left|\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha^2x^2-i\frac{px}{\hbar}}dx\right|^2$$
$$=\exp\left(-\frac{p^2}{2\alpha^2\hbar^2}\right)\left|\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\alpha^2\left(x+\frac{ip}{2\alpha^2\hbar}\right)^2\right]dx\right|^2$$
$$=\exp\left(\frac{-p^2}{2m\omega\hbar}\right),\quad \text{ở đây}\quad \alpha=\sqrt{m\omega/\hbar}.$$

1060

Một quả bóng bàn lý tưởng hóa có khối lượng m nảy ở trạng thái cơ bản trên một mặt bàn cứng trong không gian một chiều chỉ theo một phương thẳng đứng.

(a) Chứng minh rằng năng lượng phụ thuộc vào m, g, h theo biểu thức $\varepsilon = Kmg\,(m^2g/h^2)^\alpha$ với K là hằng số tỉ lệ không thứ nguyên. Hãy xác định α.

(b) Bằng phép tính biến phân hãy đánh giá hằng số K và ước lượng giá trị ε theo đơn vị erg với $m = 1$ gam.

(*Princeton*)

Lời giải:

(a) Theo phương pháp phân tích thứ nguyên nếu ta có

$$[\varepsilon] = \frac{[m]^{1+2\alpha}\,[g]^{1+\alpha}}{[h]^{2\alpha}},$$

hay

$$\frac{[m]\,[L]^2}{[T]^2} = \frac{[m]\,[L]^{1-3\alpha}}{[T]^2},$$

thì $\alpha = -\frac{1}{3}$. Như vậy với $\alpha = -\frac{1}{3}$, biểu thức trên sẽ cho ta năng lượng của quả bóng.

(b) Đặt x là tọa độ theo phương thẳng đứng với gốc tại mặt bàn. Hamiltonian là

$$H = \frac{p^2}{2m} + mgx = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + mgx,$$

lấy mặt bàn làm điểm mốc để tính thế trọng trường. Thử một hàm sóng ở trạng thái cơ bản có dạng $\psi = x\exp(-\lambda x^2/2)$, và ta phải xác định λ. Xét

$$\begin{aligned}\langle H\rangle &= \frac{\int \psi^* H\psi dx}{\int \psi^*\psi dx} \\ &= \frac{\int_0^\infty xe^{-\lambda x^2/2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + mgx\right) xe^{-\lambda x^2/2}\,dx}{\int_0^\infty x^2e^{-\lambda x^2}\,dx} \\ &= \frac{3\hbar^2}{4m}\lambda + \frac{2mg}{\sqrt{\pi}\lambda^{1/2}}.\end{aligned}$$

Để cực tiểu hóa $\langle H\rangle$, lấy $\frac{d\langle H\rangle}{d\lambda} = 0$ và thu được $\lambda = \left(\frac{4m^2g}{3\sqrt{\pi}\hbar^2}\right)^{\frac{2}{3}}$.

Như vậy năng lượng ở trạng thái cơ bản sẽ là

$$\langle H\rangle = 3\,(3/4\pi)^{1/3}\, mg\,(m^2 g/\hbar^2)^{-1/3}\,.$$

dẫn tới

$$K = 3\,(3/4\pi)^{1/3}\,.$$

Tính toán bằng số ta được

$$\begin{aligned}\varepsilon &= 3mg\left(\frac{3\hbar^2}{4\pi m^2 g}\right)^{\frac{1}{3}}\\ &= 3\times 980\times\left(\frac{3\times 1,054^2\times 10^{-54}}{4\pi\times 980}\right)^{\frac{1}{3}}\\ &= 1,9\times 10^{-16}\,\text{erg}.\end{aligned}$$

1061

Định lý dưới đây liên quan đến các trị riêng năng lượng E_n ($E_1 < E_2 < E_3 < \ldots$) của phương trình Schrödinger một chiều

Định lý: Nếu thế năng $V_1(x)$ dẫn đến các trị riêng E_{1n} và thế năng $V_2(x)$ dẫn đến các trị riêng E_{2n} và $V_1(x) \le V_2(x)$ với tất cả các giá trị của x, thì $E_{1n} \le E_{2n}$.

(a) Hãy chứng minh định lý này

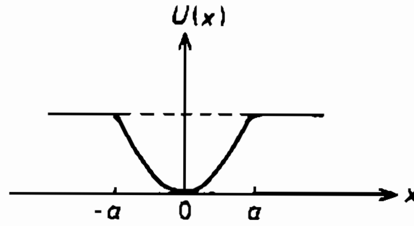
Gợi ý: Xét một thế năng $V(\lambda, x)$, ở đây $V(0, x) = V_1(x)$ và $V(1, x) = V_2(x)$ và $\partial V/\partial\lambda \ge 0$ (với mọi x), và tính $\partial E_n/\partial\lambda$.

(b) Bây giờ xét thế năng (Hình 1.31)

$$\begin{aligned}U(x) &= kx^2/2, \quad |x| < a,\\ U(x) &= ka^2/2, \quad |x| \ge a.\end{aligned}$$

Ta muốn xác định số các trạng thái liên kết mà thế năng này có thể chứa. Giả thiết số N này là $\gg 1$. Sẽ rất hữu ích nếu vẽ một bức tranh định tính về hàm sóng đối với trạng thái liên kết cao nhất.

Chọn một thế năng so sánh có thể giải được và sử dụng định lý trên để xác định cận trên hoặc cận dưới của N. (Có thể tính cả hai giá trị nhưng chỉ yêu cầu tính một trong hai.)



Hình 1.31

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Định nghĩa $V(\lambda, x) = \lambda V_2(x) + (1-\lambda)V_1(x)$. Hiển nhiên rằng $V(0, x) = V_1(x), V(1, x) = V_2(x)$, $\partial V/\partial\lambda = V_2(x) - V_1(x) \geq 0$. Hamiltonian là

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{p}^2/2m + V(\lambda, x),$$

và phương trình tìm trị riêng năng lượng là

$$\hat{H}(\lambda)\,|\,n, \lambda\rangle = E_n(\lambda)\,|\,n, \lambda\rangle,$$

ở đây $E_n(\lambda) = \langle n, \lambda\,|\,\hat{H}(\lambda)\,|\,n, \lambda\rangle$. Do

$$\begin{aligned}\partial E_n(\lambda)/\partial\lambda &= \frac{\partial}{\partial\lambda}\left[\langle n, \lambda\,|\,\hat{H}(\lambda)\,|\,n, \lambda\rangle\right] \\ &= \langle n\lambda\,|\,\partial V(\lambda)/\partial\lambda\,|\,n\lambda\rangle \\ &= \int \frac{\partial V}{\partial\lambda}\,|\psi_n(x, \lambda)|^2\,dx \geq 0,\end{aligned}$$

ta có $E_{1n} = E_n(0) \leq E_n(1) = E_{2n}$, và như vậy định lý được chứng minh. Chú ý rằng ta đã sử dụng $\langle n\lambda\,|\,n\lambda\rangle = 1$.

(b) Đặt $V(x) = kx^2/2$. Như vậy $V(x) \geq U(x)$. Nếu E_n là một mức năng lượng đối với thế năng $U(x)$, thì $E_n \leq (n + 1/2)\,\hbar\omega$, ở đây $\omega = \sqrt{k/m}$. Đối với một trạng thái liên kết, $E_n \leq ka^2/2$. Giải bất đẳng thức $(N + 1/2)\,\hbar\omega \leq ka^2/2$, ta thu được

$$N \leq \frac{m\omega a^2}{2h} - \frac{1}{2} = \left[\frac{m\omega a^2}{2\hbar}\right],$$

ở đây $[A]$ chỉ số nguyên lớn nhất nhỏ hơn A.

Bây giờ ta lựa chọn $V(x)$ là một hố thế vuông có độ sâu hữu hạn,

$$V(x) = ka^2/2, \quad |x| > a,$$
$$V(x) = 0, \qquad |x| \leq a.$$

Số các trạng thái liên kết của $U(x)$ nhỏ hơn số trạng thái liên kết của $V(x)$ là $[2m\omega a^2/\pi\hbar] + 1$. Ta có thể lấy cận trên của số các trạng thái liên kết của $U(x)$ là $[2m\omega a^2/\pi\hbar]$ vì $N \gg 1$ nên số hạng 1 có thể bỏ qua. Kết hợp lại, ta thu được số trạng thái liên kết nằm trong khoảng giữa $[m\omega a^2/2\hbar]$ và $[2m\omega a^2/\pi\hbar]$.

1062

Đối với các trạng thái electron trong hệ một chiều, Hamiltonian mẫu đơn giản là

$$H = \sum_{n-1}^{N} E_0 |n\rangle\langle n| + \sum_{n=1}^{N} W\{|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|\},$$

ở đây $|n\rangle$ là một cơ sở trực chuẩn, $\langle n | n'\rangle = \delta_{nn'}$; E_0 và W là các tham số. Giả thiết các điều kiện biên tuần hoàn sao cho $|N + j\rangle = |j\rangle$. Hãy tính các mức năng lượng và các hàm sóng.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Từ dữ kiện rằng $|n\rangle$ lập thành một tập đầy đủ các hàm trực chuẩn, ở đây $n = 1, 2, 3, \ldots, N$, và

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{N} E_0 |n\rangle\langle n| + \sum_{n=1}^{N} W\{|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|\},$$

hay

$$\hat{H} = E_0 + W(A + A^+),$$

với

$$A \equiv \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\langle n+1|, \quad A^+ \equiv \sum_{n=1}^{N} |n+1\rangle\langle n|,$$

và

$$A|n\rangle = |n-1\rangle, \quad A^+|n\rangle = |n+1\rangle,$$
$$AA^+ = A^+A = 1, \quad \text{hay} \quad A^+ = A^{-1},$$

ta biết rằng $\hat{H}$, A và A^+ có cùng các vectơ riêng. Như vậy, chỉ cần tìm các vectơ riêng và các trị riêng của toán tử A^+ là đủ. Do

$$A_{k'k} = \langle k' \mid A \mid k \rangle = \delta_{k',k-1},$$

Ta có

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \end{pmatrix}_{N \times N}$$

và do đó

$$A - \lambda I = \begin{pmatrix} -\lambda & 1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & -\lambda & 1 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -\lambda & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & -\lambda \end{pmatrix}_{N \times N},$$

nghĩa là,

$$\det (A - \lambda I) = (-\lambda)^N + (-1)^{N+1} = (-1)^N (\lambda^N - 1) = 0 ,$$

suy ra

$$\lambda_j = e^{i\theta_j},\ \theta_j = \frac{2\pi}{N} j,\ j = 0, 1, 2, \dots , N - 1.$$

Nếu $|E\rangle$ đều là các vectơ riêng của toán tử A và A^+, tức là,

$$A \mid E_j\rangle = \lambda_j \mid E_j\rangle,\ A^+ \mid E_j\rangle = \frac{1}{\lambda_j} \mid E_j\rangle,$$

thì

$$\begin{aligned} \hat{H} \mid E_j\rangle &= \left[E_0 + W \left(\lambda_j + \frac{1}{\lambda_j}\right)\right] \mid E_j\rangle \\ &= (E_0 + 2W \cos \theta_j) \mid E_j\rangle . \end{aligned}$$

Như vậy, các trị riêng của $\tilde{H}$ là

$$E_j = E_0 + 2W \cos\theta_j, \quad \text{với} \quad \theta_j = \frac{2\pi}{N} j, \quad (j = 0, 1, 2, \dots, N-1).$$

Các hàm riêng tương ứng có thể thu được từ các phương trình ma trận

$$(A - \lambda_j)\,|\,E_j\rangle = 0.$$

Như vậy

$$|E_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta_j} \\ e^{i2\theta_j} \\ \vdots \\ e^{i(N-1)\theta_j} \end{pmatrix},$$

hay

$$|E_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N} e^{i(n-1)\theta_j}\,|\,n\rangle.$$

1063

Giải thích ngắn gọn tại sao có sự hình thành các vùng năng lượng trong một tinh thể vật rắn. Sử dụng các ý tưởng của cơ học lượng tử nhưng không cần phải tính toán phức tạp. Bạn cần lưu ý rằng bất kì ai đọc lời giải thích này chỉ hiểu về cơ học lượng tử chứ không hiểu gì về lý thuyết chất rắn.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Một tinh thể có thể được xem như là một mảng các hố thế tuần hoàn vô hạn, như là cấu trúc mạng trong **Bài tập 1065.** Định lý Bloch nói rằng nghiệm của phương trình Schrödinger khi đó có dạng $u(x)\exp(iKx)$, ở đây K là hằng số và $u(x)$ tuần hoàn theo tính tuần hoàn của mạng. Các điều kiện liên tục của $u(x)$ và $du(x)/dx$ tại các thành hố giới hạn năng lượng của hạt trải trong các khoảng giá trị nhất định, tức là các dải hay vùng năng lượng. Một ví dụ

được dẫn ra chi tiết trong **Bài tập 1065**.

1064

Một hạt có khối lượng m chuyển động trong một thế năng tuần hoàn vô hạn. Thế năng này bằng không hầu như ở mọi nơi nhưng trong các vùng hẹp có độ rộng b bị ngăn cách bởi các khoảng có độ dài a ($b \ll a$) thế năng ở đó bằng V_0, ở đây V_0 là một thế dương lớn.

[Ta có thể xem thế này như là một tổng của các hàm delta Dirac

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0 \, b \, \delta(x - na).$$

Hoặc ta có thể đi tới kết luận trên theo cách dài dòng hơn bằng cách xét các đoạn hữu hạn của hàm thế năng và đưa đến giá trị giới hạn.]

(a) Các điều kiện biên thích hợp áp dụng cho các hàm sóng là gì, tại sao?

(b) Gọi năng lượng thấp nhất của một sóng có thể lan truyền qua thế này là $E_0 = \hbar^2 k_0^2/2m$ (năng lượng này xác định k_0). Hãy viết một phương trình siêu việt (không phải là một phương trình vi phân) có thể giải được để tính k_0 và do đó cũng là tính E_0.

(c) Viết hàm sóng tại năng lượng E_0 có giá trị trong khoảng $0 \leq x \leq a$ (Để thống nhất, chọn cách chuẩn hóa và thừa số pha để $\psi(x = 0) = 1$). Điều gì xảy ra với hàm sóng giữa $x = a$ và $x = a + b$?

(d) Chỉ ra rằng có các khoảng giá trị của E, lớn hơn E_0, ở đó không tồn tại hàm riêng. Tìm (chính xác) năng lượng tại đó khe năng lượng đầu tiên xuất hiện.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Phương trình Schrödinger là

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0 b \, \delta(x - na) \right] \psi(x) = E\psi(x).$$

Tích phân hai vế phương trình trên từ $x = a - \varepsilon$ tới $x = a + \varepsilon$ và cho $\varepsilon \to 0$, ta được

$$\psi'(a^+) - \psi'(a^-) = 2\Omega\psi(a),$$

ở đây $\Omega = mV_0b/\hbar^2$. Điều kiện này và điều kiện biên thứ hai

$$\psi(a^+) - \psi(a^-) = 0$$

áp dụng cho hàm sóng tại $x = na$, ở đây $n = -\infty, \ldots, -1, 0, 1, \ldots, +\infty$.

(b) Đối với $x \neq na$, tồn tại hai nghiệm cơ bản của phương trình Schrödinger

$$u_1(x) = e^{ikx}, \quad u_2(x) = e^{-ikx},$$

năng lượng tương ứng là

$$E = \hbar^2 k^2/2m.$$

Đặt

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad 0 \leq x \leq a.$$

Theo lý thuyết Bloch trong khoảng $a \leq x \leq 2a$

$$\psi(x) = e^{iKa}\left[Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)}\right],$$

ở đây K là số sóng Bloch. Từ các điều kiện trên suy ra

$$e^{iKa}(A+B) = Ae^{ika} + Be^{-ika},$$
$$ike^{iKa}(A-B) = ik(Ae^{ika} - Be^{-ika}) + 2\Omega(Ae^{ika} + Be^{-ika}).$$

Để có nghiệm A và B khác không ta cần

$$\begin{vmatrix} e^{iKa} - e^{ika} & e^{iKa} - e^{-ika} \\ ike^{iKa} - (ik + 2\Omega)e^{ika} & -ike^{iKa} + (ik - 2\Omega)e^{-ika} \end{vmatrix} = 0,$$

hay

$$\cos ka + \frac{\Omega}{k}\sin ka = \cos Ka,$$

từ đây suy ra được số sóng K. Hệ quả của điều này dẫn đến là các giá trị được phép của k bị giới hạn trong khoảng được xác định bởi

$$\left|\cos ka + \frac{\Omega}{k}\sin ka\right| \leq 1,$$

hay

$$\left(\cos ka + \frac{\Omega}{k} \sin ka\right)^2 \leq 1.$$

k_0 là cực tiểu của k thỏa mãn bất đẳng thức trên.

(c) Đối với $E = E_0$,

$$\psi(x) = Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x}, \quad 0 \leq x \leq a,$$

ở đây $k_0 = \sqrt{\frac{2mE_0}{\hbar}}$.

Chuẩn hóa hàm sóng $\psi(x = 0) = 1$ dẫn đến

$$\psi(x) = 2i\,A \sin k_0x + e^{-ik_0x}, \quad 0 \leq x \leq a.$$

Các điều kiện biên tại $x = a$, dẫn đến

$$e^{iKa} = 2i\,A \sin k_0a + e^{-ik_0a},$$

hay

$$2iA = (e^{iKa} - e^{-ik_0a})/\sin k_0a\,.$$

Như vậy

$$\psi(x) = (e^{iKa} - e^{-ik_0a})\,\frac{\sin k_0x}{\sin k_0a} + e^{-ik_0x}, \quad 0 \leq x \leq a.$$

Với $x \in [a, a + b]$, hàm sóng có dạng exp $(\pm k_1, x)$, ở đây

$$k_1 = \sqrt{2m(V_0 - E_0)}/\hbar.$$

(d) Đối với $ka = n\pi + \delta$, trong đó δ là một số dương nhỏ, ta có

$$\left|\cos ka + \frac{\Omega}{k} \sin ka\right|$$
$$= \left|\cos(n\pi + \delta) + \frac{\Omega}{k} \sin(n\pi + \delta)\right|$$
$$\approx \left|1 - \frac{\delta^2}{2} + \frac{\Omega}{k}\delta\right| \leq 1.$$

Khi δ rất nhỏ thì vế trái $\approx 1 + \Omega\delta/k > 1$. Như vậy, trong một khoảng nhất định của $k > n\pi/a$ sẽ không tồn tại hàm riêng. Mặt khác, khi $ka = n\pi$ sẽ tồn tại

các trị riêng. Vì thế năng lượng tại đó khe năng lượng đầu tiên bắt đầu thỏa mãn hệ thức $ka = \pi$, hoặc $E = \pi^2\hbar^2/2ma^2$.

1065

Ta muốn nghiên cứu sự lan truyền của sóng - hạt trong một thế tuần hoàn một chiều xây dựng bằng cách lặp đi lặp lại một đơn thế năng $V(x)$ tại các khoảng có độ dài l. $V(x)$ triệt tiêu với $|x| \geq l/2$ và đối xứng theo x (tức là $V(x) = V(-x)$). Các tính chất tán xạ của $V(x)$ có thể được tóm tắt như sau

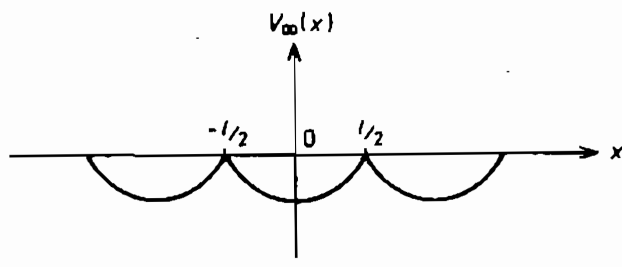
Nếu một sóng đi tới từ bên trái, $\psi_+(x) = \exp(ikx)$ với $x < -l/2$, nó sẽ tạo ra một sóng truyền qua $\psi_+(x) = \exp(ikx)$ với $x > l/2$ và một sóng phản xạ $\psi_-(x) = \exp(-ikx)$ với $x < -l/2$. Các hệ số truyền qua và phản xạ được tính theo các biểu thức sau

$$T(x) = \frac{\psi_+(|x|)}{\psi_+(-|x|)} = \frac{1}{2} e^{2ik|x|}[e^{2i\delta_e} + e^{2i\delta_0}], \quad |x| \geq \frac{l}{2},$$

$$R(x) = \frac{\psi_-(-|x|)}{\psi_+(-|x|)} \approx \frac{1}{2} e^{2ik|x|}[e^{2i\delta_e} - e^{2i\delta_0}], \quad |x| \geq \frac{l}{2}.$$

và δ_e và δ_0 là các độ dịch pha do thế năng $V(x)$. Chỉ việc sử dụng các kết quả này mà không cần phải chứng minh.

Bây giờ xét một thế năng tuần hoàn vô hạn $V_\infty(x)$ được xây dựng bằng cách lặp lại thế $V(x)$ với các tâm cách nhau một khoảng l (Hình 1.32). Gọi các điểm tại đó $V_\infty(x) = 0$ là các điểm liên thế năng. Ta sẽ xây dựng các sóng truyền trong trường thế $V_\infty(x)$ như chồng chất của các sóng chạy sang trái và sang phải ϕ_+ và ϕ_-.



Hình 1.32

(a) Viết các hệ thức độ quy liên hệ biên độ của các sóng chạy sang phải và chạy sang trái tại điểm liên thế thứ n, $\phi_\pm^n$, với biên độ tại các điểm liên thế thứ

$(n-1)$ và $(n+1)$, $\phi_{\pm}^{n-1}$ và ϕ_{+}^{n+1}.

(b) Tìm một hệ thức đệ quy tổng quát cho ϕ_- hay ϕ_+ suy ra từ hệ thức ở câu (a).

(c) Viết biểu thức tỉ số các biên độ của ϕ_+ tới ϕ_- tại các điểm liên thế năng liên tiếp.

(d) Tìm điều kiện k, δ_e và δ_0 để trên đó sóng chạy được cho phép.

(e) Sử dụng kết quả này để giải thích tại sao việc dẫn điện bằng các electron trong các chất kim loại chỉ được phép ở các vùng tồn tại các giá trị năng lượng là điều tất nhiên.

(*MIT*)

Lời giải:

Đối với sóng tới từ bên trái, thế năng là $V(x)$, đặt

$$\psi_{t+} = t\phi_+ e^{ikx}, \quad t = \frac{1}{2}(e^{i2\delta_e} + e^{i2\delta_0});$$

$$\psi_{r-} = r\phi_- e^{-ikx}, \quad r = \frac{1}{2}(e^{i2\delta_e} - e^{i2\delta_0}).$$

Đối với sóng tới từ bên phải, đặt các hệ số truyền qua và phản xạ lần lượt là t' và r'. Có thể chỉ ra rằng $t' = t$, $r' = -r^*t/t^*$. Trong thế tuần hoàn, các hệ số truyền qua và phản xạ tại các điểm liên thế kề nhau có liên hệ như sau $t_n = t_{n-1}$ và $r_n = r_{n-1}\exp(i2kl)$. Như vậy, hệ số truyền qua có thể được kí hiệu đơn giản là t.

(a) Các sóng tại các điểm liên thế kề nhau được chỉ ra trên Hình 1.33. Hiển nhiên chỉ có số hạng phản xạ của ϕ_-^n và số hạng truyền qua của ϕ_+^{n-1} là có đóng góp cho ϕ_+^n

$$\phi_+^n = r'_{n-1}\phi_-^n + t\phi_+^{n-1}. \tag{1}$$

Tương tự,

$$\phi_-^n = r_n\phi_+^n + t'\phi_-^{n+1}. \tag{2}$$

Như vậy, ta có

$$\phi_+^n = e^{i2kl}r'_n\phi_-^n + t\phi_+^{n-1}, \tag{3}$$

$$\phi_-^n = r_n\phi_+^n + t\phi_-^{n+1}. \tag{4}$$

$$\begin{array}{ccc} \phi_+^{n-1} & \phi_+^n & \phi_+^{n+1} \\ \rightarrow & \rightarrow & \rightarrow \\ \leftarrow & \leftarrow & \leftarrow \\ \phi_-^{n-1} & \phi_-^n & \phi_-^{n+1} \end{array}$$

Hình. 1.33

(b) Thay $n+1$ cho n, (1) dẫn đến

$$\phi_+^{n+1} = r'_n \phi_-^{n+1} + t\phi_+^n . \tag{5}$$

Các phương trình (3), (4), (5) dẫn đến

$$\phi_+^n = \frac{t(\phi_+^{n-1} + e^{i2kl}\phi_+^{n+1})}{1 + t^2 e^{i2kl} - r_n r'_n e^{i2kl}} .$$

Đặt $r_0 = r$. Khi đó $r_n = r \ \exp(i2nkl)$. Giả thiết $r'_n = -r_n^* t/t^*$. Khi đó $r'_n = r' \exp(-i2nkl)$. Như vậy

$$\phi_+^n = \frac{t(\phi_+^{n-1} + e^{i2kl}\phi_+^{n+1})}{1 + t^2 e^{i2kl} - rr' e^{i2kl}} . \tag{6}$$

Tương tự,

$$\phi_-^n = \frac{t(\phi_-^{n+1} + e^{i2kl}\phi_-^{n-1})}{1 + t^2 e^{i2kl} - rr' e^{i2kl}} .$$

(c) Do chu kì của thế năng là l, nên nếu $\psi(x)$ là hàm sóng trong khoảng $[x_{n-1}, x_n]$ thì $\psi(x-l)\exp(i\delta)$ là hàm sóng trong khoảng $[x_n, x_{n+1}]$. Như vậy

$$\begin{cases} \phi_+^{n+1} = e^{i(\delta - kl)}\phi_+^n , \\ \phi_-^{n+1} = e^{i(\delta + kl)}\phi_-^n . \end{cases} \tag{7}$$

Đặt $c_n = \phi_+^n/\phi_-^n$. Từ (4) và (5) ta được

$$1 = r_n c_n + t\frac{\phi_-^{n+1}}{\phi_-^n} , \tag{8}$$

$$\frac{\phi_+^{n+1}}{\phi_-^n} = r'_n \frac{\phi_-^{n+1}}{\phi_-^n} + tc_n . \tag{9}$$

Sử dụng (7), (9) có thể được viết thành

$$c_n e^{-i2kl}\frac{\phi_-^{n+1}}{\phi_-^n} = r'_n \frac{\phi_-^{n+1}}{\phi_-^n} + tc_n\,,$$

hay sử dụng (8),

$$c_n e^{-i2kl}(1 - r_n c_n) = r'_n(1 - r_n c_n) + t^2 c_n,$$

tức là,

$$r_n c_n^2 + (t^2 e^{i2kl} - r_n r'_n e^{i2kl} - 1)\,c_n + r'_n e^{i2kl} = 0.$$

Giải tìm c_n ta được

$$c_n = \frac{(1 + rr'e^{i2kl} - t^2 e^{i2kl}) \pm \sqrt{\Delta}}{2r_n}\,,$$

ở đây

$$\begin{aligned}\Delta &= (t^2 e^{i2kl} - r_n r'_n e^{i2kl} - 1)^2 - 4r_n r'_n e^{i2kl}\\ &= (t^2 e^{i2kl} - rr'e^{i2kl} - 1)^2 - 4rr'e^{i2kl}.\end{aligned}$$

(d) Điều kiện cần để một sóng bền tồn tại trong trường thế tuần hoàn vô hạn là

$$\phi_+^{n+1}/\phi_+^n = e^{i\delta_1}\,,$$

ở đây δ_1 thực và độc lập với n. Nếu điều kiện này không được thỏa mãn, khi $n \to \infty$ một trong ϕ_+^n và $\phi_+^{(-n)}$ sẽ tiến tới vô hạn. Từ (7), ta thấy rằng $\delta_1 = \delta - kl$. Từ (6) ta thu được

$$\begin{aligned}1 + t^2 e^{i2kl} - rr'e^{i2kl} &= t\left(\frac{\phi_+^{n-1}}{\phi_+^n} + e^{i2kl}\frac{\phi_+^{n+1}}{\phi_+^n}\right)\\ &= t\left[e^{i(kl-\delta)} + e^{i(kl+\delta)}\right].\end{aligned}$$

Thế $r' = -r^* t/t^*$ vào phương trình trên và sử dụng $rr^* + tt^* = 1$, ta được

$$te^{ikl} + t^* e^{-ikl} = 2tt^* \cos\delta,$$

có nghĩa là

$$\left|\frac{te^{ikl} + t^* e^{-ikl}}{2tt^*}\right| \leq 1,$$

hay sử dụng định nghĩa về t,

$$\left| \frac{\cos(2\delta_e + kl) + \cos(2\delta_0 + kl)}{1 + \cos[2(\delta_e - \delta_0)]} \right| \leq 1,$$

tức là,

$$\left| \frac{\cos(\delta_e + \delta_0 + kl)}{\cos(\delta_e - \delta_0)} \right| \leq 1.$$

Nhìn chung, chỉ một số giá trị của k thỏa mãn bất đẳng thức trên, tức là chỉ có các giá trị năng lượng trong các khoảng nhất định là được phép trong khi các khoảng còn lại bị cấm. Như vậy, ta thu được cấu trúc vùng của các mức năng lượng.

(e) Trong các kim loại, sự phân bố của các ion dương là đều đặn và do vậy các electron dẫn di chuyển trong một thế tuần hoàn. (d) chỉ cho ta thấy các sóng electron chỉ có thể có các giá trị k nhất định, tương ứng với các vùng của năng lượng electron.

1066

Cho một toán tử thực $\hat{A}$ thỏa mãn phương trình bậc hai

$$\hat{A}^2 - 3\hat{A} + 2 = 0.$$

Đây là phương trình bậc thấp nhất mà toán tử $\hat{A}$ tuân theo.

(a) Xác định các trị riêng của $\hat{A}$?

(b) Xác định các trạng thái riêng của $\hat{A}$?

(c) Chứng minh rằng $\hat{A}$ là một toán tử biểu diễn một đại lượng vật lý.

(Buffalo)

Lời giải:

(a) Do $\hat{A}$ thỏa mãn một phương trình bậc hai nên nó có thể được biểu diễn bằng một ma trận 2×2. Các trị riêng của nó là các nghiệm của phương trình bậc hai $\lambda^2 - 3\lambda + 2 = 0$, $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 2$.

(b) $\hat{A}$ được mô tả bởi ma trận

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Phương trình trị riêng

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

cho $a = 1$, $b = 0$ với $\lambda = 1$ và $a = 0$, $b = 1$ với $\lambda = 2$. Như vậy, các trạng thái riêng của $\hat{A}$ là $\binom{1}{0}$ và $\binom{0}{1}$.

(c) Do $\hat{A} = \hat{A}^+$, $\hat{A}$ là một toán tử Hermite và do đó là một toán tử biểu diễn một đại lượng vật lý.

1067

Nếu $|\psi_q\rangle$ là một trạng thái riêng nào đó của toán tử điện tích Q tương ứng với trị riêng q, tức là thỏa mãn,

$$Q|\psi_q\rangle = q|\psi_q\rangle,$$

toán tử liên hợp điện tích C tác dụng vào $|\psi_q\rangle$ dẫn đến trạng thái riêng $|\psi_{-q}\rangle$ của Q tương ứng với trị riêng $-q$

$$C|\psi_q\rangle = |\psi_{-q}\rangle.$$

(a) Tìm các trị riêng của toán tử $CQ + QC$.

(b) Một trạng thái có thể đồng thời là trạng thái riêng của C và của Q không?

(*Chicago*)

Lời giải:

(a) Đặt

$$|\psi\rangle = \sum_q c_q |\psi_q\rangle.$$

Khi đó

$$(CQ + QC)|\psi_q\rangle = qC|\psi_q\rangle + Q|\psi_{-q}\rangle = q|\psi_{-q}\rangle - q|\psi_{-q}\rangle = 0.$$

Kết luận là trị riêng của toán tử $CQ + QC$ bằng không.

(b) Do C là phép biến đổi liên hợp điện tích, $CQC^{-1} = -Q$, hay $CQ + QC = 0$, tức là C và Q không giao hoán (chúng là phản giao hoán), nên chúng

không thể có chung các trạng thái riêng. (Trừ khi $q = 0$, khi đó khái niệm liên hợp điện tích không còn ý nghĩa).

1068

Một hệ cơ học lượng tử được biết chỉ có hai trạng thái năng lượng riêng kí hiệu là $|1\rangle$ và $|2\rangle$. Hệ này cũng bao gồm ba toán tử quan sát được khác (ngoài năng lượng) là P, Q và R. Các trạng thái $|1\rangle$ và $|2\rangle$ được chuẩn hóa nhưng không nhất thiết là các trạng thái riêng của P, Q và R.

Xác định nhiều nhất các trị riêng có thể có của P, Q và R trên cơ sở các tập số liệu thực nghiệm dưới đây. [Chú ý: Một tập số liệu trong đó là phi vật lý].

(a) $\langle 1 | P | 1 \rangle = 1/2, \quad \langle 1 | P^2 | 1 \rangle = 1/4.$

(b) $\langle 1 | Q | 1 \rangle = 1/2, \quad \langle 1 | Q^2 | 1 \rangle = 1/6.$

(c) $\langle 1 | R | 1 \rangle = 1, \quad \langle 1 | R^2 | 1 \rangle = 5/4, \langle 1 | R^3 | 1 \rangle = 7/4.$

(*MIT*)

Lời giải:

Ta được cho trước ba toán tử quan sat được P, Q, R thỏa man tính Hermite $\langle n | P | m \rangle = \langle m | P | n \rangle^*$, và hệ cơ lượng tử có một tập đầy đủ các trạng thái riêng năng lượng $|1\rangle$ và $|2\rangle$.

(a) Tính đầy đủ của hai trạng thái và dữ liệu thực nghiệm dẫn đến

$$P |1\rangle = \frac{1}{2} |1\rangle + \alpha |2\rangle ,$$

ở đây α là một hằng số mà ta cần xác định. Tính trực giao của các trạng thái riêng và tính Hermite của P dẫn đến

$$\langle 1 | P | 2 \rangle = \frac{1}{2} \langle 1 | 2 \rangle + \alpha^* \langle 2 | 2 \rangle = \alpha^* .$$

Do vậy ta có

$$P |2\rangle = \alpha^* | 1\rangle + \beta |2\rangle,$$

ở đây, ta phải xác định β. Như vậy

$$\begin{aligned} P^2 |1\rangle &= P(P |1\rangle) \\ &= \frac{1}{2} P |1\rangle + \alpha P |2\rangle = (1/4 + \alpha^* \alpha) |1\rangle + (\alpha/2 + \alpha\beta) |2\rangle . \end{aligned}$$

Do $\langle 1 | P^2 | 1 \rangle = \frac{1}{4}$ theo như thực nghiệm nên $\alpha^* \alpha = 0$ và như vậy $\alpha = 0$. Do đó,

$$P |1\rangle = \frac{1}{2} |1\rangle ,$$

tức là ít nhất một trong số các trị riêng của P bằng 1/2.

(b) Đặt

$$Q |1\rangle = \frac{1}{2} |1\rangle + \gamma |2\rangle ,$$

ở đây γ cần được xác định. Bằng phương pháp tương tự, ta có $\gamma^* \gamma = 1/6 - 1/4 < 0$. Do vậy, tập số liệu này không có ý nghĩa vật lý và trị riêng của Q không xác định được.

(c) Do $\langle 1 | R | 1 \rangle = 1$, nên ta có thể viết

$$R |1\rangle = |1\rangle + \lambda |2\rangle ,$$

ở đây ta cần xác định λ. Khi đó

$$\langle 1 | R | 2 \rangle = \langle 1 | 2 \rangle + \lambda^* \langle 2 | 2 \rangle = \lambda^* ,$$

chỉ ra rằng

$$R |2\rangle = \lambda^* |1\rangle + \eta |2\rangle .$$

ở đây η cần được xác định. Xét

$$\begin{aligned} R^2 |1\rangle &= R |1\rangle + \lambda R |2\rangle \\ &= |1\rangle + \lambda |2\rangle + \lambda\lambda^* |1\rangle + \lambda\eta |2\rangle . \end{aligned}$$

Khi đó vì

$$\langle 1 | R^2 | 1 \rangle = 1 + \lambda\lambda^* = \frac{5}{4} ,$$

ta có

$$\lambda\lambda^* = \frac{1}{4} ,$$

và như vậy

$$\lambda = \frac{1}{2} \exp (i\delta),$$

và

$$\begin{aligned} R |1\rangle &= |1\rangle + \frac{1}{2} e^{i\delta} |2\rangle , \\ R |2\rangle &= \frac{1}{2} e^{-i\delta} |1\rangle + \eta |2\rangle , \\ R^2 |1\rangle &= \frac{5}{4} |1\rangle + \frac{1}{2} (1 + \eta) e^{i\delta} |2\rangle . \end{aligned}$$

Từ đó cũng suy ra

$$\begin{aligned} R^3 |1\rangle &= \frac{5}{4} R |1\rangle + \frac{1}{2} (1 + \eta) e^{i\delta} R |2\rangle \\ &= \frac{5}{4} |1\rangle + \frac{5}{8} e^{i\delta} |2\rangle + \frac{1}{4} (1 + \eta) |1\rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} (1 + \eta) \eta e^{i\delta} |2\rangle . \end{aligned}$$

Về mặt thực nghiệm $\langle 1 | R^3 | 1 \rangle = \frac{7}{4}$. Như vậy $\frac{5}{4} + \frac{1}{4} (1 + \eta) = \frac{7}{4}$, suy ra $\eta = 1$. Trên tập cơ sở $|1\rangle$ và $|2\rangle$ ma trận của R là

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} e^{-i\delta} \\ \frac{1}{2} e^{i\delta} & 1 \end{pmatrix} .$$

Để tìm các trị riêng của R ta phải giải phương trình

$$\begin{vmatrix} 1 - \lambda & \frac{1}{2} e^{-i\delta} \\ \frac{1}{2} e^{i\delta} & 1 - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

tức là, $(1 - \lambda)^2 - \frac{1}{4} = (1 - \lambda - \frac{1}{2})(1 - \lambda + \frac{1}{2}) = 0$, và thu được các trị riêng của $R = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$.

1069

Cho một hạt tích điện trong một từ trường, hãy tìm các quy tắc giao hoán đối với các toán tử tương ứng với các thành phần của vận tốc.

(Berkeley)

Lời giải:

Giả thiết rằng từ trường xuất phát từ một thế vectơ **A**. Khi đó các thành phần vận tốc của hạt là

$$\hat{v}_i = \hat{P}_i/m - qA_i/mc.$$

Do đó,

$$
\begin{aligned}
[\hat{v}_i, \hat{v}_j] &= \frac{1}{m^2}\left[\hat{P}_i - \frac{q}{c}A_i, \hat{P}_j - \frac{q}{c}A_j\right] \\
&= \frac{q}{m^2 c}\{[\hat{p}_j, A_i] - [\hat{p}_i, A_j]\} = \frac{i\hbar q}{mc^2}\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right) \\
&= \frac{i\hbar q}{m^2 c}\sum_{k=1}^{3}\varepsilon_{ijk}B_k ,
\end{aligned}
$$

ở đây ε_{ijk} là tenxơ Levi-Civita, việc sử dụng các quy tắc trên xuất phát từ quy tắc tương ứng $\hat{p}_i \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_i}$.

1070

Sử dụng hệ thức giao hoán xung lượng - tọa độ để chứng minh rằng

$$\sum_n (E_n - E_0)\,|\langle n\,|\,x\,|\,0\rangle|^2 = \text{hằng số},$$

ở đây E_n là năng lượng ứng với trạng thái riêng $|n\rangle$. Tìm giá trị của hằng số này. Cho Hamiltonian có dạng $H = p^2/2M + V(x)$.

(Berkeley)

Lời giải:

Do

$$H = p^2/2M + V(x),$$

ta có

$$[H, x] = \frac{1}{2M}[p^2, x] = -i\hbar p/M,$$

và do đó

$$[[H, x], x] = -\frac{i\hbar}{M}[p, x] = -\hbar^2/M.$$

Suy ra

$$\langle m|\,[[H, x], x]\,|m\rangle = -\frac{\hbar^2}{M}.$$

Mặt khác,

$$
\begin{aligned}
\langle m|[[H, x], x]|m\rangle &= \langle m| Hx^2 - 2xHx + x^2H|m\rangle \\
&= 2E_m \langle m|x^2|m\rangle - 2\langle m|xHx|m\rangle \\
&= 2E_m \sum_n |\langle m|x|n\rangle|^2 - 2\sum_n E_n |\langle m|x|n\rangle|^2 \\
&= 2\sum_n (E_m - E_n)|\langle m|x|n\rangle|^2 .
\end{aligned}
$$

Trong biểu thức trên ta đã sử dụng

$$
\begin{aligned}
H|m\rangle &= E_m|m\rangle , \\
\langle m|x^2|m\rangle &= \sum_n \langle m|x|n\rangle\langle n|x|m\rangle \\
&= \sum_n |\langle m|x|n\rangle|^2 \\
\langle m|xHx|m\rangle &= \sum_n \langle m|xH|n\rangle\langle n|x|m\rangle \\
&= \sum_n E_n\langle m|x|n\rangle\langle n|x|m\rangle \\
&= \sum_n E_n|\langle m|x|n\rangle|^2 .
\end{aligned}
$$

Cân bằng hai kết quả trên và đặt $m = 0$, ta thu được

$$\sum_n (E_n - E_0)|\langle n|x|0\rangle|^2 = \hbar^2/2M.$$

1071

(a) Cho một toán tử Hermite A với các trị riêng a_n và các hàm riêng $u_n(x)$ $[n = 1, 2, \ldots, N;\ 0 \le x \le L]$, hãy chỉ ra rằng toán tử $\exp(iA)$ là toán tử unita.

(b) Ngược lại, cho ma trận U_{mn} của một toán tử unita, hãy xây dựng ma trận của một toán tử Hermite biểu diễn qua ma trận U_{mn}.

(c) Cho một toán tử Hermite thứ hai B với các trị riêng b_m và các hàm riêng $v_m(x)$, hãy xây dựng một biểu diễn của toán tử unita V biến đổi các vectơ riêng của B thành các vectơ riêng của A.

(*Chicago*)

Lời giải:

(a) Do $A^+ = A$, vì A là toán tử Hermite, ta có

$$\{\exp(iA)\}^+ = \exp(-iA^+) = \exp(-iA) = \{\exp(iA)\}^{-1}.$$

Như vậy, $\exp(iA)$ là toán tử unita.

(b) Đặt

$$C_{mn} = U_{mn} + U^*_{nm} = U_{mn} + (U^+)_{mn}\,,$$

tức là,

$$C = U + U^+$$

Do $U^{++} = U$, $C^+ = C$. Do đó, $C_{mn} = U_{mn} + U^*_{nm}$ là biểu diễn ma trận của một toán tử Hermite.

(c) Các hàm riêng của một toán tử Hermite tạo nên một tập đầy đủ và trực giao. Như vậy $|u_m\rangle$ bất kì có thể được khai triển theo một tập đầy đủ $|v_n\rangle$

$$|u_m\rangle = \sum_k |v_k\rangle\langle v_k|u_m\rangle \equiv \sum_k |v_k\rangle V_{km}\,,$$

với V_{km} được định nghĩa,

$$V_{km} = \int_0^L v^*_k(x)\,u_m(x)\,dx.$$

Tương tự,

$$\begin{aligned}
|v_n\rangle &= \sum_j |u_j\rangle\langle u_j|v_n\rangle \\
&= \sum_j |u_j\rangle\langle v_n|u_j\rangle^* \\
&= \sum_j |u_j\rangle V^*_{nj} \\
&= \sum_j |u_j\rangle \tilde{V}^*_{jn} \\
&= \sum_j |u_j\rangle V^+_{jn}\,.
\end{aligned}$$

Do đó

$$|u_m\rangle = \sum_j \sum_k |u_j\rangle V^+_{jk} V_{km} = \sum_j |u_j\rangle \delta_{jm},$$

hay

$$V^+V = 1,$$

tức là,

$$V^+ = V^{-1},$$

chứng tỏ rằng V là toán tử unita. Như vậy, V là toán tử unita biến đổi các vectơ riêng của B thành các vectơ riêng của A.

1072

Xét một dao động tử một chiều với Hamiltonian

$$H = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2.$$

(a) Hãy tìm sự phụ thuộc thời gian của các giá trị kì vọng của các toán tử vị trí ban đầu và xung lượng ban đầu

$$x_0 = x \cos \omega t - (p/m\omega) \sin \omega t,$$

$$p_0 = p \cos \omega t + m\omega x \sin \omega t.$$

(b) Các toán tử này có giao hoán với Hamiltonian không?

(c) Các kết quả của bạn trong hai câu (a) và (b) có phù hợp với nhau không? Hãy thảo luận.

(d) Viết phương trình chuyển động của các toán tử trong biểu diễn Heisenberg?

(e) Hãy tính giao hoán tử $[p_0, x_0]$. Ý nghĩa của nó trong lý thuyết đo là gì?

(Princeton)

Lời giải:

(a) Sử dụng hệ thức

$$\frac{df}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[f, H] + \frac{\partial f}{\partial t},$$

ta có

$$\begin{aligned}\frac{d\langle x_0\rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\overline{[\langle x\rangle \cos\omega t, H]} - \omega\langle x\rangle \sin\omega t \\ &\quad - \frac{1}{i\hbar}\overline{\left[\frac{\langle p\rangle}{m\omega}\sin\omega t, H\right]} - \frac{\langle p\rangle}{m}\cos\omega t \\ &= \frac{1}{i\hbar}\overline{[x, H]}\cos\omega t - \omega\langle x\rangle \sin\omega t \\ &\quad - \frac{1}{m\omega}\frac{1}{i\hbar}\overline{[p, H]}\sin\omega t - \frac{1}{m}\langle p\rangle\cos\omega t = 0,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{d\langle p_0\rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\overline{[\langle p\rangle \cos\omega t, H]} - \langle p\rangle\omega \sin\omega t \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar}\overline{[m\omega\langle x\rangle \sin\omega t, H]} + m\omega^2\langle x\rangle\cos\omega t \\ &= \frac{1}{i\hbar}\overline{[p, H]}\cos\omega t - \omega\langle p\rangle \sin\omega t \\ &\quad + \frac{m\omega}{i\hbar}\overline{[x, H]}\sin\omega t + m\omega^2\langle x\rangle\cos\omega t = 0.\end{aligned}$$

Như vậy, giá trị kì vọng của các toán tử này không phụ thuộc vào thời gian.

(b) Xét

$$\begin{aligned}[x_0, H] &= [x, H]\cos\omega t - \frac{[p, H]}{m\omega}\sin\omega t \\ &= \frac{i\hbar p}{m}\cos\omega t + i\hbar\omega x\sin\omega t, \\ [p_0, H] &= [p, H]\cos\omega t + m\omega[x, H]\sin\omega t \\ &= -i\hbar m\omega^2 x\cos\omega t + i\hbar\omega p\sin\omega t.\end{aligned}$$

Như vậy, các toán tử x_0, p_0 không giao hoán với H.

(c) Các kết quả (a) và (b) vẫn phù hợp nhau. Vì khi các biểu thức của x_0 và p_0 chứa t một cách tường minh thì tính không giao hoán của chúng với H không loại trừ tính chất bảo toàn của chúng. Thực vậy

$$\begin{aligned}\frac{dx_0}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[x_0, H] + \frac{\partial x_0}{\partial t} = 0, \\ \frac{dp_0}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[p_0, H] + \frac{\partial p_0}{\partial t} = 0,\end{aligned}$$

chỉ cho thấy chúng thực tế được bảo toàn.

(d) Trong biểu diễn Heisenberg, phương trình chuyển động của một toán tử là

$$dA/dt = \frac{1}{i\hbar}[A,\ H] + \frac{\partial A}{\partial t}.$$

Như vậy, các phương trình chuyển động của x_0 và p_0 lần lượt là

$$dx_0/dt = 0, \quad dp_0/dt = 0.$$

(e) Sử dụng các biểu thức của x_0 và p_0, ta có

$$\begin{aligned}
[p_0\,, x_0] &= [p\cos\omega t + m\omega x\sin\omega t,\ x_0] \\
&= [p,\ x_0]\ \cos\omega t + [x,\ x_0]\, m\omega\ \sin\omega t \\
&= \left[p,\ x\ \cos\omega t - \frac{p}{m\omega}\ \sin\omega t\right]\ \cos\omega t \\
&\quad + \left[x,\ x\ \cos\omega t - \frac{p}{m\omega}\ \sin\omega t\right]\ m\omega\ \sin\omega t. \\
&= [p,\ x]\ \cos^2\omega t - [x,\ p]\ \sin^2\ \omega t \\
&= -\,[x,\ p] = -i\hbar,
\end{aligned}$$

do $[x,\ x] = [p,\ p] = 0$, $[x,\ p] = i\hbar$.

Nhìn chung, nếu hai toán tử quan sát được A và B thỏa mãn phương trình

$$[A,\ B] = i\hbar,$$

thì các độ lệch căn quân phương ΔA, ΔB, khi chúng được đo một cách đồng thời phải thỏa mãn nguyên lý bất định

$$\Delta A\cdot\Delta B \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Trong trường hợp này, các phép đo đồng thời của vị trí và xung lượng theo cùng một hướng phải dẫn đến

$$\Delta x\cdot\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Hệ thức chỉ ra

$$\sqrt{\overline{\Delta x_0^2}}\sqrt{\overline{\Delta p_0^2}} \geq \hbar/2\,.$$

Đây là hệ thức giữa các giới hạn trên có thể của độ chính xác của hai đại lượng khi ta đo chúng đồng thời.

PHẦN II

THẾ XUYÊN TÂM

2001

Một electron bị giam trong một hố thế ba chiều vô hạn. Các cạnh song song với các trục x, y, và z và chiều dài mỗi cạnh là L.

(a) Hãy viết phương trình Schrödinger thích hợp.

(b) Hãy viết hàm sóng không phụ thuộc thời gian tương ứng với trạng thái năng lượng cực tiểu.

(c) Tính số các trạng thái N có năng lượng thấp hơn một giá trị E cho trước. Giả thiết $N \gg 1$.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Phương trình Schrödinger là

$$i\hbar\partial\psi(\mathbf{r},t)/\partial t = -(\hbar^2/2m)\nabla^2\psi(\mathbf{r},t), \qquad 0 \le x, y, z \le L,$$
$$\psi = 0, \qquad \text{với các giá trị } x, y, z \text{ còn lại.}$$

(b) Bằng cách tách các biến, ta có thể viết hàm sóng dưới dạng tích của ba hàm sóng mỗi hàm sóng ứng với một trường hợp hố thế vô hạn một chiều. Hàm sóng của mức năng lượng cực tiểu là

$$\psi_{111}(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_1(y)\psi_1(z),$$

ở đây

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right), \quad \text{v.v.}$$

Như vậy

$$\psi_{111}(x, y, z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{L}\right).$$

Năng lượng tương ứng là $E_{111} = 3\hbar^2\pi^2/2mL^2$.

(c) Đối với một tập các số lượng tử n_x, n_y, n_z ứng với ba chiều, năng lượng là

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right).$$

Như vậy, số N các trạng thái mà năng lượng của chúng nhỏ hơn hoặc bằng E bằng số các tập ba số nguyên dương n_x, n_y, n_z thỏa mãn bất đẳng thức

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \leq \frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2} E .$$

Xét một hệ tọa độ Đềcác có các trục n_x, n_y, n_z. Số N cần tìm về trị số bằng thể tích của góc phần tám thứ nhất của một quả cầu bán kính $(2mL^2E/\hbar^2\pi^2)^{1/2}$, với điều kiện $N \geq 1$. Như vậy

$$N = \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2} E\right)^{3/2} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{mL^2}{2\hbar^2\pi^2} E\right)^{3/2} .$$

2002

Một hạt quark (khối lượng $= m_p/3$) bị giam giữ trong một hộp lập phương với các cạnh dài 2 fermi $= 2 \times 10^{-15}$ m. Hãy tìm năng lượng để đưa quark từ trạng thái cơ bản tới trạng thái kích thích thứ nhất theo MeV.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Các mức năng lượng trong hộp lập phương được tính bởi

$$E_{n_1n_2n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), \quad n_i = 1, 2, \ldots .$$

Như vậy, năng lượng ở trạng thái cơ bản là $E_{111} = 3\hbar^2\pi^2/2ma^2$, và ở trạng thái kích thích đầu tiên là $E_{211} = 6\hbar^2\pi^2/2ma^2 = 3\hbar^2\pi^2/ma^2$. Như vậy, năng lượng kích thích từ trạng thái cơ bản đến trạng thái kích thích đầu tiên là

$$\Delta E = 3\hbar^2\pi^2/2ma^2 = \frac{1,5\pi^2\hbar^2c^2}{mc^2a^2}$$
$$= \frac{1,5\pi^2(6,58 \times 10^{-22})^2 \times (3 \times 10^8)^2}{\left(\frac{938}{3}\right) \times (2 \times 10^{-15})^2} = 461 \text{ MeV} .$$

2003

Một tinh thể NaCl có một số chỗ khuyết iôn âm, mỗi chỗ khuyết này chứa một electron. Coi các electron chuyển động tự do bên trong một thể tích mà

các kích thước của nó bằng cỡ hằng số mạng. Tinh thể ở nhiệt độ phòng. Cho một đánh giá bằng số bước sóng dài nhất của bức xạ điện từ bị các electron này hấp thụ mạnh.

(*MIT*)

Lời giải:

Các mức năng lượng của một electron trong một hộp lập phương có các cạnh a được tính bởi

$$E_{nmk} = (\pi^2\hbar^2/2ma^2)(n^2 + m^2 + k^2),$$

ở đây n, m và k là các số nguyên dương. Cho $a \sim 1$ Å, năng lượng trạng thái cơ bản là $E_{111} = 3\hbar^2\pi^2/2ma^2 \approx 112$ eV. Đối với một tinh thể ở nhiệt độ phòng, các electron hầu như toàn bộ nằm ở trạng thái cơ bản. Bước sóng dài nhất tương ứng với một chuyển dời từ trạng thái cơ bản đến trạng thái kích thích gần nhất

$$\Delta E = E_{211} - E_{111} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2} = 112 \text{ eV},$$

ứng với bước sóng

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{\Delta E} = 110 \text{ Å}.$$

2004

Một electron bị giam bên trong của một hốc cầu rỗng bán kính R có các thành không xuyên qua được. Hãy tìm một biểu thức cho áp suất tác dụng lên các thành hốc gây bởi electron đó ở trạng thái cơ bản.

(*MIT*)

Lời giải:

Ở trạng thái cơ bản, $l = 0$, và nếu ta đặt hàm sóng xuyên tâm là $R(r) = \chi(r)/r$, vậy thì $\chi(r)$ thỏa mãn phương trình

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\chi = 0 \quad \text{với } r < R,$$

$$\chi = 0 \quad \text{với } r \geq R,$$

ở đây μ là khối lượng nghỉ của electron. $R(r)$ là hữu hạn tại $r = 0$, do đó $\chi(0) = 0$. Các nghiệm thỏa mãn điều kiện này là

$$\chi_n = \sqrt{\frac{2}{R}}\sin\frac{n\pi r}{R}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

với năng lượng tương ứng

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu R^2} n^2 .$$

Lực trung bình F mà electron tác dụng theo phương bán kính vào thành hốc được tính bởi

$$F = \left\langle -\frac{\partial \hat{V}}{\partial R} \right\rangle = -\left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial R} \right\rangle = -\frac{\partial}{\partial R} \langle \hat{H} \rangle = -\frac{\partial E}{\partial R} .$$

Do electron ở trạng thái cơ bản nên, $n = 1$ và

$$F = -\partial E_1/\partial R = \pi^2\hbar^2/\mu R^3 .$$

áp suất tác dụng lên thành hốc là

$$p = F/4\pi R^2 = \pi\hbar^2/4\mu R^5 .$$

2005

Một hạt khối lượng m bị hạn chế chuyển động giữa hai quả cầu đồng tâm không xuyên qua được có các bán kính $r = a$ và $r = b$. Cho biết không có thế năng nào khác tác dụng. Hãy tìm năng lượng trạng thái cơ bản và hàm sóng chuẩn hóa của nó.

(*MIT*)

Lời giải:

Đặt hàm sóng xuyên tâm của hạt là $R(r) = \chi(r)/r$. Như vậy $\chi(r)$ thỏa mãn phương trình

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \chi(r) = 0 .$$

$$(a \le r \le b)$$

Đối với trạng thái cơ bản, $l = 0$, vì vậy chỉ hàm sóng xuyên tâm là không tầm thường. Do $V(r) = 0$, đặt $K^2 = 2mE/\hbar^2$, ta rút gọn phương trình lại thành

$$\chi'' + K^2\chi = 0 .$$

với

$$\chi\,|_{r=a} = \chi\,|_{r=b} = 0\,.$$

$\chi(a) = 0$ yêu cầu nghiệm phải có dạng

$$\chi(r) = A\sin\left[K(r-a)\right].$$

Như vậy, từ điều kiện $\chi(b) = 0$, ta thu được các giá trị cho phép của K

$$K = n\pi/(b-a), \quad (n = 1, 2, \ldots)$$

Đối với hạt ở trạng thái cơ bản, tức là $n = 1$, ta thu được năng lượng

$$E = \hbar^2K^2/2m = \hbar^2\pi^2/2m(b-a)^2\,.$$

Từ điều kiện chuẩn hóa

$$\int_a^b R^2(r)\,r^2\,dr = \int_a^b \chi^2(r)\,dr = 1\,,$$

ta thu được $A = \sqrt{2/(b-a)}$. Như vậy, ở trạng thái cơ bản, hàm sóng xuyên tâm chuẩn hóa là

$$R(r) = \sqrt{\frac{2}{b-a}}\,\frac{1}{r}\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}\,,$$

và hàm sóng chuẩn hóa là

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{2}{b-a}}\,\frac{1}{r}\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}\,.$$

2006

(a) Đối với một dao động tử điều hòa với $H = (p^2/m + kx^2)/2$, hãy chỉ ra rằng năng lượng ở trạng thái cơ bản có giá trị thấp nhất phù hợp với nguyên lý bất định.

(b) Hàm sóng của trạng thái ở đó cực tiểu nguyên lý bất định được thỏa mãn là một hàm Gauss $\exp(-\alpha x^2)$. Sử dụng điều này nhưng không giải bất kì một phương trình vi phân nào, hãy tìm giá trị của α.

(c) Sử dụng các toán tử tăng giảm, nhưng không giải bất kì một phương trình vi phân nào, hãy viết biểu thức hàm sóng (chưa chuẩn hóa) của trạng thái kích thích đầu tiên của dao động tử điều hòa.

(d) Đối với một dao động tử ba chiều, hãy viết trong tọa độ cực các hàm sóng của trạng thái kích thích đầu tiên bị suy biến và là một trạng thái riêng của l_z.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Trạng thái cơ bản của dao động tử điều hòa có tính chẵn sao cho

$$\bar{x} = \langle 0 \,|\, x \,|\, 0 \rangle = 0. \qquad \bar{p} = \langle 0 \,|\, p \,|\, 0 \rangle = 0;$$

và như vậy

$$\overline{\Delta p^2} = \overline{p^2}, \qquad \overline{\Delta x^2} = \overline{x^2} \,.$$

Nguyên lý bất định đòi hỏi

$$\overline{\Delta p^2} \cdot \overline{\Delta x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \,.$$

Điều đó dẫn đến

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{k}{2}\,\overline{x^2} \\ &\geq \sqrt{\frac{k}{m}}\,\sqrt{\overline{p^2} \cdot \overline{x^2}} \\ &\geq \frac{\hbar}{2}\,\sqrt{\frac{k}{m}} = \hbar\omega/2 = E_0 \,, \end{aligned}$$

do $\sqrt{\frac{k}{m}} = \omega$. Như vậy, năng lượng của trạng thái cơ bản có giá trị thấp nhất phù hợp với nguyên lý bất định.

(b) Sử dụng hàm sóng đã cho, ta tính

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} x^2\, dx \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2}\, dx = 1/4\alpha,$$

$$\overline{p^2} = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\alpha x^2}\, dx \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = \hbar^2 \alpha \,,$$

và do vậy

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{k}{2} \cdot \frac{1}{4\alpha} \,.$$

Từ $\frac{dE}{d\alpha} = 0$ ta thấy rằng khi $\alpha = \sqrt{km}/2\hbar = m\omega/2\hbar$ thì năng lượng là cực tiểu. Do vậy, $\alpha = m\omega/2\hbar$.

(c) Trong biểu diễn Fock của dao động tử điều hòa, ta định nghĩa

$$\hat{a} = i(\hat{p} - im\omega\hat{x})/\sqrt{2m\hbar\omega},$$
$$\hat{a}^+ = -i(\hat{p} + im\omega\hat{x})/\sqrt{2m\hbar\omega}.$$

Như vậy $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$,

$$H = (\hat{a}^+\hat{a} + 1/2)\,\hbar\omega.$$

Kí hiệu hàm sóng ở trạng thái cơ bản là $|0\rangle$. Do $H|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle$, phương trình trên dẫn đến $\hat{a}^+\hat{a}|0\rangle = 0$. Điều này cũng dẫn đến

$$\begin{aligned} H(\hat{a}^+|0\rangle) &= \frac{1}{2}\,\hbar\omega\hat{a}^+|0\rangle + \hbar\omega\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+|0\rangle \\ &= \frac{1}{2}\,\hbar\omega\hat{a}^+|0\rangle + \hbar\omega\hat{a}^+(\hat{a}^+\hat{a} + 1)|0\rangle \\ &= \frac{3}{2}\,\hbar\omega(\hat{a}^+|0\rangle). \end{aligned}$$

Như vậy

$$\begin{aligned} |1\rangle = \hat{a}^+|0\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + im\omega x\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \\ &= \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\,x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \end{aligned}$$

trong biểu diễn tọa độ.

(d) Đối với một dao động tử ba chiều, hàm sóng là

$$\psi_{n_1n_2n_3}(\mathbf{r}) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z).$$

Đối với trạng thái cơ bản, $(n_1, n_2, n_3) = (0, 0, 0)$. Đối với các trạng thái kích thích, $(n_1, n_2, n_3) = (1, 0, 0)$; $(0, 1, 0)$; $(0, 0, 1)$.

$$\psi_{100}(\mathbf{r}) = N_0^2N_1 2\alpha x\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2r^2\right),$$

$$\psi_{010}(\mathbf{r}) = N_0^2N_1 2\alpha y\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2r^2\right),$$

$$\psi_{001}(\mathbf{r}) = N_0^2N_1 2\alpha z\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2r^2\right).$$

Khai triển x, y, z theo các hàm cầu và kết hợp các hàm sóng lại, ta thu được các trạng thái riêng của l_z

$$\psi_m(\mathbf{r}) = N_m \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2\right) rY_{1m}(\theta, \varphi).$$

ở đây

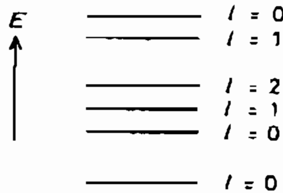
$$N_m^{-1} = \sqrt{2}/\alpha^2 .$$

Chú ý rằng ở đây $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$, theo định nghĩa thông thường, khác với biểu thức của α ở câu (b).

2007

Giản đồ (Hình 2.1) chỉ ra sáu mức năng lượng thấp nhất và các mômen xung lượng tương ứng của một hạt có spin bằng không và chuyển động trong một thế xuyên tâm ba chiều nào đó. Giả thiết không tồn tại các suy biến ngẫu nhiên trong phổ năng lượng này. Hãy cho biết số nút (các lần đổi dấu) của hàm sóng xuyên tâm tương ứng với từng mức năng lượng.

(*MIT*)



Hình 2.1

Lời giải:

Hàm sóng xuyên tâm của một hạt trong một trường thế xuyên tâm ba chiều có thể được viết dưới dạng $R(r) = \chi(r)/r$. Với số lượng tử l đã cho, phương trình được thỏa mãn bởi $\chi(r)$ có dạng phương trình Schrödinger một chiều. Do đó, nếu bất kì một phổ năng lượng nào không có suy biến ngẫu nhiên thì vai trò của các nút trong hàm sóng xuyên tâm của hạt giống như vai trò của chúng ở hàm sóng một chiều. Đối với các trạng thái liên kết, định lý Sturn vẫn áp dụng được, nghĩa là, $\chi(r)$ tuân theo lý thuyết Sturn: hàm sóng xuyên tâm của trạng thái cơ bản không có nút, trong khi hàm sóng của trạng thái kích thích thứ n có n nút. Như vậy, đối với một trạng thái liên kết năng lượng E_n, có số lượng tử $n = n_r + l + 1$, hàm sóng xuyên tâm có n_r nút.

Đối với số lượng tử $l = 0$, số nút ứng với ba mức năng lượng (trình tự từ thấp đến cao) là 0, 1 và 2.

Tương tự, đối với $l = 1$, số nút là 0 và 1; với $l = 2$, số nút là 0.

Như vậy, số nút ứng với các mức năng lượng chỉ ra trên Hình 2.1 là 0, 1, 0, 0, 1, 2, từ thấp đến cao.

2008

Một hạt có khối lượng m và điện tích q bị giữ ở gốc bởi một lực phục hồi tuyến tính đối xứng cầu. Các mức năng lượng có khoảng cách đều nhau và bằng $\hbar\omega_0$ ở trên mức năng lượng cơ bản $E_0 = 3\hbar\omega_0/2$. Các trạng thái cũng có thể được mô tả bằng cách khác theo hệ cơ sở Đềcác (ba dao động tử điều hòa một chiều) hoặc theo hệ cơ sở cầu (trường xuyên tâm, được phân tách thành các chuyển động góc và chuyển động xuyên tâm).

(a) Trong hệ cơ sở Đềcác hãy lập bảng các số chiếm chỗ của các trạng thái dao động tử khác nhau ở trạng thái cơ bản và ba trạng thái kích thích đầu tiên. Xác định sự suy biến toàn phần của từng trạng thái này.

(b) Trong hệ cơ sở cầu, hãy viết (không cần giải) phương trình chuyển động xuyên tâm.
(Lưu ý rằng trong các tọa độ cầu $\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{L^2}{r^2}$, ở đây L^2 là toán tử bình phương mômen xung lượng quỹ đạo toàn phần tính theo đơn vị $\hbar^2$.)

Hãy chỉ ra thế hiệu dụng và đồ thị của thế đó. Với mỗi một mômen xung lượng đã cho, hãy vẽ hàm sóng xuyên tâm ở trạng thái cơ bản (với một giá trị l cho trước) và các hàm sóng xuyên tâm của hai trạng thái kế tiếp có cùng giá trị l.

(c) Đối với bốn trạng thái của phần (a), hãy liệt kê giá trị của mômen xung lượng và tính chẵn lẻ của các trạng thái trong từng mức. So sánh sự suy biến toàn phần với các đáp số trong câu (a).

(d) Trạng thái kích thích thứ hai ($E_2 = 7\hbar\omega_0/2$) có thể có hiệu ứng Stark được không? Tại sao? So sánh những điểm giống và khác nhau giữa mức dao động tử này và mức kích thích thứ hai ($n = 3$) của nguyên tử hydro phi tương đối tính.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Bảng 2.1

Mức năng lượng	Các số chiếm chỗ	Bậc suy biến
E_0	$\|0, 0, 0\rangle$	1
E_1	$\|1, 0, 0\rangle, \|0, 1, 0\rangle, \|0, 0, 1\rangle$	3
E_2	$\|2, 0, 0\rangle, \|0, 2, 0\rangle, \|0, 0, 2\rangle$	6
	$\|1, 1, 0\rangle, \|1, 0, 1\rangle, \|0, 1, 1\rangle$	
E_3	$\|3, 0, 0\rangle, \|0, 3, 0\rangle, \|0, 0, 3\rangle$	10
	$\|2, 1, 0\rangle, \|0, 2, 1\rangle, \|1, 0, 2\rangle$	
	$\|1, 2, 0\rangle, \|0, 1, 2\rangle, \|2, 0, 1\rangle$	
	$\|1, 1, 1\rangle$	

Bảng 2.1

(b) Đặt

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)\,Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

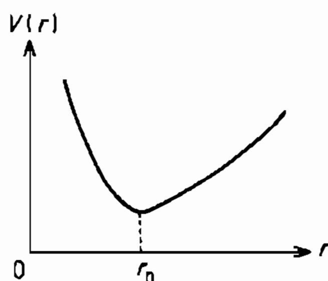
Hàm sóng xuyên tâm $R(r)$ thỏa mãn phương trình

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R\right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m}{2}\omega^2 r^2\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0,$$

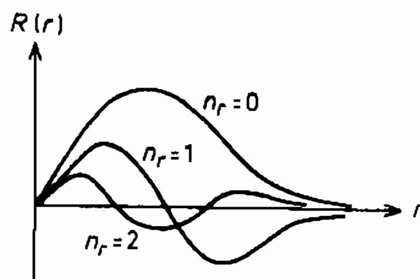
sao cho thế hiệu dụng là

$$V_{\text{eff}} = m\omega^2 r^2/2 + \hbar^2 l(l+1)/2mr^2,$$

được vẽ trên Hình 2.2, ở đây $r_0 = [\hbar^2 l(l+1)/m^2\omega^2]^{1/4}$. Hình dáng hàm sóng của ba trạng thái thấp nhất ứng với một giá trị l cho trước được chỉ ra trên Hình 2.3.



Hình 2.2



Hình 2.3

Chú ý rằng số các nút của hàm sóng bằng n_r.

(c) Bảng 2.2

E	l	m	P	D
E_0	0	0	+	1
E_1	1	0, ±1	−	3
E_2	2	0, ±1, ±2	+	6
	0	0		
E_3	3	0, ±1, ±2, ±3	−	10
	1	0, ±1		

Bảng 2.2

Chú ý: P = tính chẵn lẻ, D = bậc suy biến.

(d) Trạng thái kích thích thứ hai không có hiệu ứng Stark tuyến tính bởi vì x là một toán tử có tính lẻ trong khi tất cả các trạng thái suy biến của E_2 có tính chẵn, dẫn đến tất cả các phần tử ma trận H' trong không gian con của mức năng lượng E_2 đều bằng không.

Mặt khác, đối với mức năng lượng kích thích thứ hai của nguyên tử hydro, $n = 3$, các trạng thái suy biến của nó có cả tính chẵn và tính lẻ, do đó có sự xuất hiện hiệu ứng Stark.

2009

(a) Một hạt phi tương đối tính có khối lượng m chuyển động trong trường thế

$$V(x, y, z) = A(x^2 + y^2 + 2\lambda xy) + B(z^2 + 2\mu z),$$

ở đây $A > 0, B > 0, |\lambda| < 1$, μ có giá trị tùy ý. Hãy tìm các trị riêng năng lượng.

(b) Bây giờ xét bài toán được thay đổi với một trường thế mới $V_{\text{mới}}$ như sau: với $z > -\mu$ và x, y bất kì ta có, $V_{\text{mới}} = V$, ở đây V giống như trong câu (a); với $z < -\mu$ và x, y bất kì ta có, $V_{\text{mới}} = +\infty$. Hãy tìm năng lượng trạng thái cơ bản.

(CUS)

Lời giải:

(a) Ta chọn hai biến mới μ, t được định nghĩa bởi

$$\mu = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + y), \quad t = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - y),$$

hay

$$x = (\mu + t)/\sqrt{2}, \quad y = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mu - t),$$

và viết thế năng như sau

$$\begin{aligned} V(x, y, z) &= A\left[\frac{1}{2}(\mu^2 + t^2 + 2\mu t) + \frac{1}{2}(\mu^2 + t^2 - 2\mu t)\right. \\ &\quad \left. + 2\lambda \cdot \frac{1}{2}(\mu^2 - t^2)\right] + B(z^2 + 2\mu z) \\ &= A[(1 + \lambda)\mu^2 + (1 - \lambda)t^2] + B(z^2 + 2\mu z) \end{aligned}$$

và các vi phân theo các trục

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial \mu}\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{\partial}{\partial t}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}, \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \left(\frac{\partial^2}{\partial \mu^2}\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{\partial^2}{\partial \mu \partial t}\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{1}{\sqrt{2}} \\ &\quad + \left(\frac{\partial^2}{\partial t \partial \mu}\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{\partial^2}{\partial t^2}\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}; \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial \mu}\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{\sqrt{2}}, \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \left(\frac{\partial^2}{\partial \mu^2}\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\partial^2}{\partial \mu \partial t}\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{1}{\sqrt{2}} \\ &\quad - \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial^2}{\partial t \partial \mu}\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\partial^2}{\partial t^2}\frac{1}{\sqrt{2}}\right), \\ \nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \end{aligned}$$

Phương trình Schrödinger trở thành

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \mu^2} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\phi(\mu, t, z) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(\mu, t, z)]\phi(\mu, t, z) = 0.$$

Đặt $\phi(\mu, t, z) = U(\mu)T(t)Z(z)$. Phương trình trên có thể được tách thành

$$\frac{\partial^2}{\partial\mu^2} U(\mu) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_1 - A(1+\lambda)\mu^2] U(\mu) = 0,$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} T(t) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_2 - A(1-\lambda)t^2] T(t) = 0,$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) + (2m/\hbar^2) [E_3 - B(z^2 + 2\mu z)] Z(z) = 0,$$

với

$$E_1 + E_2 + E_3 = E.$$

Bằng cách đặt $z' = z + \mu$, $E_3' = E_3 + B\mu^2$, cả ba phương trình trên có thể được rút gọn thành phương trình của một dao động tử điều hòa. Như vậy, các trị riêng năng lượng là

$$E_1 = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1, \qquad \omega_1 = \sqrt{\frac{2A}{m}(1+\lambda)};$$

$$E_2 = \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2, \qquad \omega_2 = \sqrt{\frac{2A}{m}(1-\lambda)};$$

$$E_3 = \left(n_3 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_3 - B\mu^2, \quad \omega_3 = \sqrt{\frac{2B}{m}}.$$

$$(n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, 3, \dots)$$

(b) Với một trường thế mới $V_{\text{mới}}$ sao cho $z < -\mu$, $V_{\text{mới}} = \infty$ và với $z > -\mu$, $V_{\text{mới}}$ giống như thế năng ở câu (a), hàm sóng phải bị triệt tiêu khi $z \to -\mu$. Phương trình đối với Z có nghiệm

$$Z \sim H_{n_3}(\zeta) e^{-\zeta^2/2},$$

ở đây $\zeta = (2mB/\hbar^2)^{1/4}(z + \mu)$, $H_{n_3}(\zeta)$ là đa thức Hermite thứ n_3 và mang tính chẵn lẻ của n_3. Như vậy n_3 phải là một số nguyên lẻ. Trạng thái cơ bản là trạng thái với $n_1 = n_2 = 0$ và $n_3 = 1$, với năng lượng tương ứng

$$E = \hbar(\omega_1 + \omega_2)/2 + 3\hbar\omega_3/2 - B\mu^2.$$

2010

Một hạt có khối lượng m chuyển động trong thế năng logarit

$$V(r) = C \ln(r/r_0).$$

Chứng tỏ rằng:

(a) Tất cả các trạng thái riêng có cùng vận tốc bình phương trung bình. Hãy tìm vận tốc bình phương trung bình đó.

(b) Khoảng cách giữa hai mức bất kì không phụ thuộc vào khối lượng m.

(*CUS*)

Lời giải:

(a) Ta có

$$\langle \mathbf{v}^2 \rangle = \langle \mathbf{P}^2/m^2 \rangle = \frac{1}{m^2} \langle \mathbf{P}^2 \rangle = \frac{1}{m^2} \int d^3\mathbf{r} \psi^* \mathbf{P}^2 \psi$$

và, với một trạng thái dừng, định luật virial dẫn đến

$$\langle \hat{T} \rangle = \frac{1}{2} \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle.$$

Như vậy

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{v}^2 \rangle = \langle \mathbf{P}^2/m^2 \rangle &= \frac{1}{m} \cdot 2\langle T \rangle = \frac{1}{m} \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle \\
&= \frac{1}{m} \int d^3\mathbf{r} \cdot \left(r \frac{d}{dr} C \ln r/r_0 \right) \psi^* \psi \\
&= \frac{C}{m} \int d^3\mathbf{r} \, |\psi|^2 = \frac{C}{m},
\end{aligned}$$

đúng với mọi trạng thái riêng.

(b) Do

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_n}{\partial m} &= \left\langle \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial m} \right| \right\rangle = \left\langle \left| -\frac{\mathbf{P}^2}{2m^2} \right| \right\rangle = -\frac{1}{2} \langle \mathbf{v}^2 \rangle \\
&= -\frac{C}{2m},
\end{aligned}$$

$\partial E_n/\partial m$ không phụ thuộc vào n. Điều đó dẫn đến

$$\frac{\partial(E_n - E_{n-1})}{\partial m} = -\frac{C}{2m} + \frac{C}{2m} = 0,$$

nghĩa là, $E_n - E_{n-1}$ không phụ thuộc vào khối lượng m.

2011

Giả thiết ta biết trước các trạng thái riêng của một nguyên tử hydro bị cô lập trong không gian và được viết dưới dạng thông thường như sau

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) .$$

Hạt nhân của nguyên tử hydro được định vị tại một khoảng d cách thành một hố thế vô hạn có xu hướng làm biến dạng nguyên tử hydro đó.

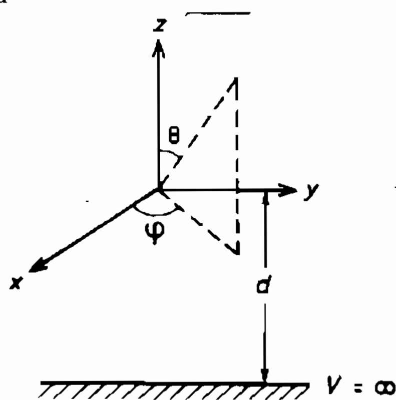
(a) Hãy tìm dạng tường minh của hàm sóng trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro này khi d tiến tới không.

(b) Hãy tìm các trạng thái riêng khác của nguyên tử hydro này trong nửa không gian, tức là $d \to 0$, dưới dạng R_{nl} và Y_{lm}.

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Chọn hệ tọa độ với gốc tại tâm hạt nhân và trục z vuông góc với bề mặt thành hố thế như chỉ ra trên Hình 2.4. Khi $d \to 0$, các nghiệm của phương trình Schrödinger vẫn là $R_{nl}Y_{lm}$ trong nửa không gian $z > 0$ tức là, $0 < \theta < \pi/2$, nhưng chúng phải thỏa mãn điều kiện $\psi = 0$ tại $\theta = \pi/2$ ở đây $V = \infty$. Như vậy, chỉ các nghiệm thỏa mãn $l + m =$ lẻ là được chấp nhận. Do $|m| \leq l$, hàm cầu phù hợp đầu tiên là



Hình 2.4

Do $n \geq l + 1$, hàm sóng trạng thái cơ bản là $R_{21}Y_{10}$.

(b) Tất cả các trạng thái riêng khác có các hàm sóng $R_{nl}Y_{lm}$ ở đây $l + m =$ số lẻ. Đối với l cho trước, ta có $m = l - 1, l - 3, \dots, -l + 1$ và như vậy có bậc suy biến là l.

2012

Tại thời điểm $t = 0$ hàm sóng đối với nguyên tử hydro là

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{10}}(2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1}),$$

ở đây các chỉ số dưới là giá trị của các số lượng tử n, l, m. Bỏ qua các chuyển dời spin và bức xạ.

(a) Giá trị kì vọng của năng lượng của hệ này là bao nhiêu?

(b) Tính xác suất tìm thấy hệ với $l = 1$, $m = +1$ như một hàm của thời gian là bao nhiêu?

(c) Tính xác suất tìm thấy electron trong vùng 10^{-10} cm quanh proton (tại thời điểm $t = 0$)? (Chấp nhận kết quả gần đúng).

(d) Hàm sóng này biến đổi theo thời gian như thế nào, tức là xác định dạng của $\psi(\mathbf{r}, t)$?

(e) Giả thiết một phép đo được thực hiện cho thấy $L = 1$ và $L_z = +1$. Hãy mô tả hàm sóng ngay sau khi một phép đo như vậy dưới dạng hàm ψ_{nlm} được sử dụng ở trên.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Sử dụng tính trực giao của các hàm sóng, giá trị kì vọng của năng lượng là

$$\begin{aligned}
E = \langle\psi | H | \psi\rangle &= \frac{1}{10}\langle 2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1} | 2E_1\psi_{100} \\
&\quad + E_2\psi_{210} + \sqrt{2}E_2\psi_{211} + \sqrt{3}E_2\psi_{21-1}\rangle \\
&= \frac{1}{10}(4E_1 + E_2 + 2E_2 + 3E_2) = \frac{1}{10}(4E_1 + 6E_2) \\
&= 0,55E_1 = -\frac{0,55}{2}mc^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \\
&= -\frac{0,55}{2} \times 0,51 \times 10^6 \times \frac{1}{137^2} = -7,47 \text{ eV},
\end{aligned}$$

vì đối với nguyên tử hydro $E_1 = -me^4/2\hbar^2$, $E_2 = \frac{1}{4}E_1$.

(b) Do

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\psi(0)\rangle\,.$$

ta có

$$\langle n11\,|\,\psi(t)\rangle = \delta_{n2}\left\langle 211\left|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\right|\psi(0)\right\rangle$$
$$= \delta_{n2}\sqrt{\frac{1}{5}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_2t\right)\,,$$

ở đây đã sử dụng hàm sóng tại $t = 0$. Như vậy, xác suất cần phải tìm là

$$P = |\langle n11\,|\,\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{5}\,\delta_{n2}\,.$$

Vậy, nếu $n = 2$, $P = 1/5$; còn nếu không thì $P = 0$.

(c) Đặt $\alpha = 10^{-10}$ cm. Ta có

$$P = \int_0^\alpha \psi^*\psi\, r^2\,dr\,d\Omega$$
$$= \int_0^\alpha \frac{1}{10}\left(4\,|\,R_{10}\,|^2 + 6\,|\,R_{21}\,|^2\right) r^2\,dr\,,$$

ở đây cũng đã sử dụng hàm sóng cho trước như trong câu (a). Đối với nguyên tử hydro

$$|\,R_{10}\,|^2 = \frac{4}{a^3}\,e^{-2r/a}, \quad |\,R_{21}\,|^2 = \frac{r^2}{24a^5}\,e^{-r/2a}\,,$$

với $a = 5,29\times 10^{-9}$ cm. Do $r \le \alpha \ll a$, nên ta có thể lấy gần đúng

$$e^{-2r/a} \approx 1 - \frac{2r}{a}, \quad e^{-r/2a} \approx 1 - \frac{r}{2a}\,.$$

Do đó, ta có

$$P \approx \frac{4}{10}\int_0^\alpha \frac{4}{a^3}\left(1 - \frac{2r}{a}\right) r^2\,dr + \frac{6}{10}\int_0^\alpha \frac{r^2}{24a^5}\left(1 - \frac{r}{2a}\right) r^2\,dr$$
$$= \left[\frac{4}{3}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^3 - 2\left(\frac{\alpha}{a}\right)^4\right]\frac{4}{10} + \frac{6}{10}\left[\frac{1}{120}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^5 - \frac{1}{288}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^6\right]$$
$$\approx \frac{8}{15}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^3 \approx 3,6\times 10^{-6}\,.$$

(d) Hàm sóng tại thời điểm t là

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right]\psi(\mathbf{r}, 0)$$

$$= \sqrt{\frac{1}{10}}[2e^{-i\omega_1 t}\psi_{100} + e^{-i\omega_2 t}\psi_{210}$$

$$+ \sqrt{2}e^{-i\omega_2 t}\psi_{211} + \sqrt{3}e^{-i\omega_2 t}\psi_{21-1}],$$

ở đây $\omega_1 = E_1/\hbar$, $\omega_2 = E_2/\hbar$.

(e) Do $n \geq L + 1$, với $L = 1$ ta có $n = 2$. Hệ quả là vectơ trạng thái cần phải có dạng

$$|\rangle = C_+|211\rangle + C_0|210\rangle + C_-|21-1\rangle .$$

Sử dụng $L_x = (L_+ + L_-)/2$, với $L_-Y_{lm} = \sqrt{(l-m+1)(l+m)}Y_{lm-1}$, $L_+Y_{lm} = \sqrt{(l+m+1)(l-m)}Y_{lm+1}$, ta có thể viết $L_x|\rangle = |\rangle$ thành

$$\frac{1}{2}\{\sqrt{2}C_0|211\rangle + \sqrt{2}(C_+ + C_-)|210\rangle + \sqrt{2}C_0|21-1\rangle\}$$

$$= C_+|211\rangle + C_0|210\rangle + C_-|21-1\rangle ,$$

và thu được

$$C_+ = C_- = \frac{C_0}{\sqrt{2}} .$$

Như vậy

$$|\rangle = \frac{1}{2}C_0(\sqrt{2}|211\rangle + 2|210\rangle + \sqrt{2}|21-1\rangle) .$$

Chuẩn hóa

$$\langle|\rangle = \frac{C_0^2}{4}(2+4+2) = 1$$

suy ra $C_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Như vậy

$$|\rangle = \frac{1}{2}(|211\rangle + \sqrt{2}|210\rangle + |21-1\rangle) .$$

2013

Năng lượng trạng thái cơ bản và bán kính Bohr của nguyên tử hydro là $E_0 = -e^2/2a_0$, $a_0 = \hbar^2/me^2$, ở đây m là khối lượng rút gọn của hệ.

[$m_e = 9,11 \times 10^{-28}$ g, $m_p = 1,67 \times 10^{-24}$ g, $e = 4,80 \times 10^{-10}$ e.s.u., $\hbar = 1,05 \times 10^{-27}$ erg s.]

(a) Tính năng lượng trạng thái cơ bản và bán kính Bohr của nguyên tử positroni (đó là nguyên tử gồm 1 electron quay quanh một positron - ND).

(b) Bậc suy biến của trạng thái cơ bản của nguyên tử positroni gây bởi spin của electron bằng bao nhiêu? Viết các hàm sóng spin khả dĩ có các giá trị spin toàn phần xác định cùng với các trị riêng tương ứng.

(c) Trạng thái cơ bản của nguyên tử positroni có thể suy giảm bởi sự phân hủy của nó thành các photon. Hãy tính năng lượng và mômen xung lượng giải phóng trong quá trình đó và chứng minh rằng phải tồn tại ít nhất hai photon ở trạng thái cuối cùng.

(Buffalo)

Lời giải:

(a) Khối lượng rút gọn m của nguyên tử positroni được tính bởi $\frac{1}{m} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_e}$, tức là, $m = m_e/2$. Sử dụng giá trị này, ta tính được

$$E_0 = \frac{-e^2}{2a_0} = -\frac{mc^2}{2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = \frac{-0,51 \times 10^6}{4 \times 137^2} = -6,8 \text{ eV},$$

$$a_0 = 1,05 \times 10^{-8} \text{ cm}.$$

(b) Bậc suy biến của trạng thái cơ bản của nguyên tử positroni bằng 4. Kí hiệu positron là 1 và electron là 2, và đặt các trạng thái riêng theo phương z của một đơn hạt là α và β, lần lượt tương ứng với các trị riêng $\hbar/2$ và $-\hbar/2$. Vậy thì các trạng thái riêng cơ bản với spin tổng cộng xác định $S = s_1 + s_2$ và thành phần theo phương z của spin tổng cộng $S_z = s_{1z} + s_{2z}$ là

$$\alpha(1)\alpha(2), \qquad S = \hbar, \quad S_z = \hbar.$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)], \quad S = \hbar, \quad S_z = 0.$$

$$\beta(1)\beta(2), \qquad S = \hbar, \quad S_z = -\hbar.$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)], \quad S = 0, \quad S_z = 0.$$

(c) Năng lượng giải phóng trong quá trình hủy chủ yếu bắt nguồn từ các khối lượng nghỉ của electron và positron, $\Delta E = 2m_ec^2 = 1,02$ MeV. Mômen xung lượng được giải phóng phụ thuộc vào trạng thái của nguyên tử positroni

trước khi bị hủy. Ở trạng thái cơ bản $S = 0$, không có mômen xung lượng được giải phóng. Ở trạng thái $S = \hbar$, mômen xung lượng được giải phóng là $\Delta J = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar = \sqrt{2}\hbar$. Sẽ phải có ít nhất hai photon ở trạng thái hủy, bởi vì nếu chỉ có một photon được tạo ra trong quá trình hủy một nguyên tử positroni thì cả năng lượng và xung lượng của hệ đều không được bảo toàn. Điều này có thể được chỉ ra qua một lập luận đơn giản. Nếu một photon có năng lượng E thì cùng một lúc nó phải có một xung lượng E/c. Như vậy, xung lượng của photon không thể bằng không trong bất kì một hệ quy chiếu nào. Nhưng trong hệ quy chiếu nguyên tử positroni đứng yên thì xung lượng bằng không trong suốt quá trình hủy. Như vậy ta đi đến kết luận rằng có ít nhất hai photon ở trạng thái cuối cùng của quá trình hủy để xung lượng của chúng triệt tiêu nhau trong hệ quy chiếu nguyên tử positroni.

2014

Xét electron chuyển động trong một thế đối xứng cầu $V = kr$, ở đây $k > 0$.

(a) Sử dụng nguyên lý bất định để đánh giá năng lượng trạng thái cơ bản.

(b) Sử dụng quy tắc lượng tử hóa Bohr-Sommerfeld để tính năng lượng trạng thái cơ bản.

(c) Cũng đánh giá năng lượng trạng thái cơ bản bằng cách sử dụng nguyên lý biến phân và một hàm sóng thử do anh (chị) tự chọn.

(d) Giải chính xác trị riêng năng lượng và hàm riêng cho trạng thái cơ bản.

(Gợi ý: Sử dụng biến đổi Fourier.)

(e) Viết biểu thức thế năng hiệu dụng cho các trạng thái có mômen xung lượng khác không.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Nguyên lý bất định phát biểu rằng

$$\Delta p \Delta r \geq \frac{\hbar}{2},$$

ở đây

$$\begin{aligned}\Delta p &= [\overline{(p-\bar{p})^2}]^{1/2} = [(\overline{p^2 - 2p\bar{p} + \bar{p}^2})]^{1/2} \\ &= (\overline{p^2} - \bar{p}^2)^{1/2},\end{aligned}$$

$$\Delta r = (\overline{r^2} - \bar{r}^2)^{1/2}.$$

Thế năng có tính đối xứng cầu, do vậy ta có thể cho $\bar{p} = 0$, tức là $\Delta p \approx \sqrt{\overline{p^2}}$. Với năng lượng được đánh giá là

$$E = \frac{\overline{p^2}}{2m} + k\bar{r},$$

ta cũng cho

$$\Delta r \sim \bar{r}.$$

Như vậy

$$E \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} + k\Delta r \geq \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{k\hbar}{2\Delta p}.$$

Đối với năng lượng trạng thái cơ bản E, ta có

$$\frac{\partial E}{\partial \Delta p} = \frac{\Delta p}{m} - \frac{k\hbar}{2(\Delta p)^2} = 0,$$

suy ra

$$\Delta p = \left(\frac{mk\hbar}{2}\right)^{1/3}$$

và

$$E = \frac{3}{2}\left(\frac{k^2\hbar^2}{4m}\right)^{1/3}.$$

(b) Quy tắc lượng tử hóa Bohr-Sommerfeld là

$$\oint P_r\, dr = n_r h, \quad \oint P_\phi\, d\phi = n_\phi h.$$

Chọn các tọa độ cực sao cho hạt chuyển động trong mặt phẳng $\theta = \pi/2$. Trạng thái được đặc trưng bởi $n_r = 0$, $n_\phi = 1$, và quỹ đạo có dạng đường tròn bán kính a. Tích phân thứ hai dẫn đến

$$P_\varphi = I\omega = ma^2\omega = \hbar.$$

Lực hướng tâm là

$$F_r = -\frac{dV}{dr} = -k = -m\omega^2 a.$$

Kết hợp lại ta có $a = (\hbar^2/mk)^{1/3}$, và như vậy

$$E_0 = P_\Phi^2/2ma^2 + ka = \frac{3}{2}(k^2\hbar^2/m)^{1/3}.$$

(c) Khái niệm về trạng thái cơ bản không phụ thuộc vào θ và ϕ. Sử dụng hàm sóng thử $\psi = \exp(-\lambda r)$ và đánh giá

$$\bar{H} = \frac{\langle\psi\,|\,\hat{H}\,|\psi\rangle}{\langle\psi\,|\,\psi\rangle},$$

ở đây

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + kr.$$

Do

$$\begin{aligned}\langle\psi\,|\,\hat{H}\,|\,\psi\rangle &\propto -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty e^{-\lambda r}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}e^{-\lambda r}\right) r^2 dr \\ &\quad + k\int_0^\infty r^3 e^{-2\lambda r}\,dr \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\lambda\int_0^\infty\left(\frac{2}{r}-\lambda\right)e^{-2\lambda r}r^2\,dr + \frac{k3!}{(2\lambda)^4} \\ &= \frac{\hbar^2}{8m\lambda} + \frac{3k}{8\lambda^4}.\end{aligned}$$

$$\langle\psi\,|\,\psi\rangle \propto \int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2\,dr = \frac{2}{(2\lambda)^3} = \frac{1}{4\lambda^3},$$

ta có

$$\bar{H} = \frac{\hbar^2\lambda^2}{2m} + \frac{3k}{2\lambda}.$$

Đối với một chuyển động ổn định, $\bar{H}$ là cực tiểu. Khi đó đặt

$$\frac{\partial\bar{H}}{\partial\lambda} = 0,$$

ta tìm được

$$\lambda = \left(\frac{3mk}{2\hbar^2}\right)^{1/3}.$$

và do đó

$$\bar{H} = \frac{9}{4}\frac{k}{\lambda} = \frac{3}{2}\left(\frac{9}{4}\frac{k^2\hbar^2}{m}\right)^{1/3}.$$

(d) Phương trình Schrödinger cho chuyển động xuyên tâm có thể được viết thành

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}\chi + (kr - E)\chi = 0,$$

ở đây $\chi = rR$, R là hàm sóng xuyên tâm. Ở trạng thái cơ bản, hàm sóng góc là hằng số. Bằng phép biến đổi

$$y = \left(\frac{2mk}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(r - \frac{E}{k}\right),$$

phương trình Schrödinger trở thành phương trình Airy

$$\frac{d^2\chi(y)}{dy^2} - y\chi(y) = 0,$$

có nghiệm là $Ai(-x)$ và $Ai(x)$, ở đây $x = -|y|$, với $y < 0$ và $y > 0$ tương ứng. Các điều kiện biên $R(r)$ và $R'(r)$ liên tục tại $r = \frac{E}{k}$, tức là $y = 0$, được thỏa mãn một cách đương nhiên do $Ai(x) = Ai(-x)$, $Ai'(x) = Ai'(-x)$ với $x \to 0$. Điều kiện để $R(r)$ hữu hạn tại $r \to 0$ đòi hỏi $Ai(-x) = rR(r) \to 0$ khi $r \to 0$. Giá trị không đầu tiên của $Ai(-x)$ xảy ra tại $x = x_0 \approx 2,35$. Như vậy, năng lượng trạng thái cơ bản là

$$E_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2mk}\right)^{\frac{1}{3}} kx_0,$$

và hàm riêng trạng thái cơ bản là

$$R(r) = \frac{1}{r}Ai(-x) \qquad \text{với} \qquad x = \left(\frac{2mk}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\left(\frac{E_0}{k} - r\right).$$

(e) Thế hiệu dụng đối với trường hợp mômen xung lượng khác không là

$$V_{\text{eff}} = kr + \hbar^2 l(l+1)/2mr^2.$$

2015

Tương tác của các hạt quark nặng thường được tính gần đúng bằng một thế năng phi tương đối tính không phụ thuộc spin, là một hàm tuyến tính của bán kính r, ở đây r là khoảng cách giữa các hạt quark $V(r) = A + Br$. Như vậy, các "charmoni" nổi tiếng ψ và ψ', với các năng lượng nghỉ 3,1 GeV và

3,7 GeV (1 GeV= 10^9 eV), được xem như là các trạng thái liên kết với $n = 0$ và $n = 1$ có mômen quỹ đạo bằng không của một hạt quark duyên khối lượng $m_c = 1,5$ GeV/c^2 (tức là $E = 1,5$ GeV) và một phản quark có cùng khối lượng trong thế tuyến tính nói trên. Tương tự như thế, các hạt upsilon được tìm thấy gần đây Υ và Υ', được xem như là các trạng thái liên kết với $n = 0$ và $n = 1$ có mômen quỹ đạo bằng không của một hạt quark đáy (bottom quark) và cặp phản quark ở cùng một thế năng. Khối lượng nghỉ của quark đáy là $m_b = 4,5$ GeV/c^2. Năng lượng nghỉ của Υ là 9,5 GeV.

(a) Sử dụng phép phân tích thứ nguyên, hãy suy ra một hệ thức giữa sự tách mức năng lượng của ψ và ψ' và sự tách mức của Υ và Υ', từ đó đánh giá năng lượng nghỉ của Υ'. (Biểu diễn tất cả các năng lượng theo đơn vị GeV).

(b) Gọi hạt charmoni với $n = 2$ có mômen quỹ đạo bằng không là ψ''. Sử dụng gần đúng WKB để đánh giá sự tách năng lượng của ψ' và ψ'' dưới dạng tách năng lượng của ψ và ψ', từ đó đưa ra đánh giá bằng số của năng lượng nghỉ của ψ''.

(*Princeton*)

Lời giải:

Trong hệ khối tâm của một hạt quark và phản quark của nó, phương trình chuyển động tương đối là

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r)\right]\psi(\mathbf{r}) = E_R\psi(\mathbf{r}), \quad \mu = m_q/2,$$

ở đây E_R là năng lượng chuyển động tương đối, m_q là khối lượng của hạt quark. Khi mômen quỹ đạo góc bằng không, phương trình trên trong tọa độ cầu có thể được viết đơn giản lại thành

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) + V(r)\right]R(r) = E_R R(r).$$

Đặt $R(r) = \chi_0(r)/r$. Khi đó $\chi_0(r)$ thỏa mãn phương trình

$$\frac{d^2\chi_0}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E_R - V(r)\right]\chi_0 = 0,$$

nghĩa là,

$$\frac{d^2\chi_0}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E_R - A - Br\right)\chi_0 = 0\,.$$

(a) Giả thiết năng lượng của một trạng thái liên kết phụ thuộc vào số lượng tử chính n (là một đại lượng không có thứ nguyên), hằng số B trong $V(r)$, khối lượng rút gọn của hạt quark μ, và $\hbar$, nghĩa là

$$E = f(n) B^x \mu^y \hbar^z .$$

Do,

$$[E] = [M][L]^2 [T]^{-2} ,$$
$$[B] = [M][L][T]^{-2}, \quad [\mu] = [M]$$
$$[\hbar] = [M][L]^2 [T]^{-1} ,$$

ta có

$$x = z = \frac{2}{3}, \quad y = -\frac{1}{3}$$

và như vậy

$$E = f(n) (B\hbar)^{2/3} (\mu)^{-1/3} ,$$

ở đây $f(n)$ là một hàm của số lượng tử chính n. Như vậy

$$\Delta E_\psi = E_{\psi'} - E_\psi = f(1) \frac{(B\hbar)^{2/3}}{\mu_c^{1/3}} - f(0) \frac{(B\hbar)^{2/3}}{\mu_c^{1/3}}$$
$$= \frac{(B\hbar)^{2/3}}{\mu_c^{1/3}} [f(1) - f(0)] ,$$

và tương tự

$$\Delta E_\Upsilon = \frac{(B\hbar)^{2/3}}{\mu_b^{1/3}} [f(1) - f(0)] .$$

Do đó

$$\frac{\Delta E_\Upsilon}{\Delta E_\psi} = \left(\frac{\mu_c}{\mu_b}\right)^{1/3} = \left(\frac{1}{3}\right)^{1/3} .$$

Do

$$E_{\Upsilon'} - E_\Upsilon \approx 0,42 \text{ GeV} ,$$
$$E_{\Upsilon'} = E_\Upsilon + 0,42 = 9.5 + 0,42 \approx 9,9 \text{ GeV} .$$

(b) Áp dụng gần đúng WKB cho phương trình của χ_0 ta thu được quy tắc lượng tử hóa Bohr-Sommerfeld

$$2\int_0^a \sqrt{2\mu(E_R - A - Br)}\, dr = (n + 3/4)\hbar \quad \text{với} \quad a = \frac{E_R - A}{B} ,$$

Viết E_n thay cho E_R, ta có

$$E_n = A + \frac{\left[3\ \left(n + \frac{3}{4}\right)\ B\hbar/4\right]^{2/3}}{(2\mu)^{1/3}} .$$

Áp dụng cho sự tách năng lượng dẫn đến

$$E_{\psi'} - E_{\psi} = \frac{(B\hbar)^{2/3}}{(2\mu_c)^{1/3}} \left[\left(\frac{21}{16}\right)^{2/3} - \left(\frac{9}{16}\right)^{2/3}\right] .$$

$$E_{\psi''} - E_{\psi'} = \frac{(B\hbar)^{2/3}}{(2\mu_c)^{1/3}} \left[\left(\frac{33}{16}\right)^{2/3} - \left(\frac{21}{16}\right)^{2/3}\right] ,$$

và như vậy

$$\frac{E_{\psi''} - E_{\psi'}}{E_{\psi'} - E_{\psi}} = \frac{(33)^{2/3} - (21)^{2/3}}{(21)^{2/3} - (9)^{2/3}} \approx 0,81 .$$

Do vậy

$$E_{\psi''} - E_{\psi'} = 0,81 \times (E_{\psi'} - E_{\psi}) = 0,81 \times (3,7 - 3,1)\ \text{GeV},$$

và

$$E_{\psi''} = 3,7 + 0,49 \approx 4,2\ \text{GeV}.$$

2016

Hai hạt, mỗi hạt có khối lượng M, hút nhau bởi một thế

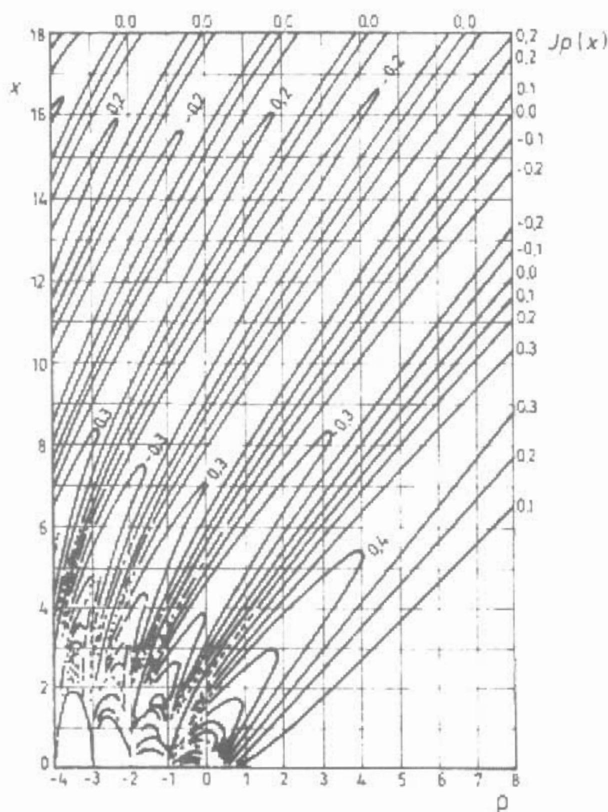
$$V(r) = -(g^2/d) \exp(-r/d) ,$$

ở đây $d = \hbar/mc$ với $mc^2 = 140$ triệu eV (tức 140 MeV), $Mc^2 = 940$ MeV.

(a) Chỉ ra rằng với $l = 0$ phương trình Schrödinger cho hệ này có thể rút gọn thành phương trình vi phân Bessel

$$\frac{d^2 J_\rho(\mathbf{x})}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{dJ_\rho(x)}{dx} + \left(1 - \frac{\rho^2}{x^2}\right) J_\rho(x) = 0$$

bằng cách đổi biến $x = \alpha \exp(-\beta r)$ với sự lựa chọn thích hợp của α và β.



Hình 2.5

(b) Giả thiết rằng hệ này chỉ có một trạng thái liên kết với năng lượng bằng 2,2 MeV; hãy ước lượng bằng số đại lượng $g^2/\hbar c$ và nêu đơn vị của nó.

[Chú ý: Một đồ thị các giá trị của $J_\rho(x)$ trong mặt phẳng $x-\rho$ đã cho trước ở phần dữ kiện (Hình 2.5)].

(c) Giá trị cực tiểu của $g^2/\hbar c$ phải bằng bao nhiêu để tồn tại hai trạng thái liên kết với $l=0$ (d và M vẫn được giữ không đổi)?

(MIT)

Lời giải:

(a) Khi $l=0$, hàm sóng xuyên tâm $R(r)=\chi(r)/r$ thỏa mãn phương trình

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2}+\frac{M}{\hbar^2}\left(E+\frac{g^2}{d}e^{-r/d}\right)\chi(r)=0\,.$$

khối lượng rút gọn là $\mu = M/2$. Bằng cách đổi biến

$$r \to x = \alpha e^{-\beta r}, \quad x \in [0, \alpha],$$

và viết $\chi(r) = J(x)$, ta có

$$\frac{d^2 J(x)}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{dJ(x)}{dx} + \left[\frac{Mg^2}{\hbar^2 d\beta^2}\left(\frac{x}{\alpha}\right)^{1/d\beta}\frac{1}{x^2} + \frac{ME}{\hbar^2\beta^2}\frac{1}{x^2}\right] J(x) = 0\,.$$

Đặt

$$\alpha = \frac{2g}{\hbar}\sqrt{Md}, \quad \beta = \frac{1}{2d},$$

và

$$\rho^2 = \frac{4d^2 M\,|\,E\,|}{\hbar^2} = -\frac{4d^2 ME}{\hbar^2},$$

ta có thể rút gọn phương trình Schrödinger trên thành phương trình Bessel bậc ρ

$$\frac{d^2 J_\rho(x)}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{dJ_\rho(x)}{dx} + \left(1 - \frac{\rho^2}{x^2}\right) J_\rho(x) = 0.$$

Như vậy, hàm sóng xuyên tâm (chưa chuẩn hóa) là

$$R(r) = \frac{J_\rho(\alpha e^{-\beta r})}{r}\,.$$

(b) Đối với các trạng thái liên kết ta cần khi $r \to \infty$, $R(r) \to 0$, hay là J_ρ vẫn còn là hữu hạn. Điều này đòi hỏi $\rho \geq 0$. $R(r)$ cũng phải xác định tại $r = 0$, có nghĩa là $\chi(0) = J_\rho(\alpha) = 0$.

Phương trình này có một số vô hạn các nghiệm thực. Với $E = 2,2$ MeV,

$$\rho = \frac{2d}{\hbar}\sqrt{M\,|\,E\,|} = \frac{2}{mc^2}\sqrt{Mc^2\,|\,E\,|} = \frac{2}{140}\sqrt{940 \times 2,2} \approx 0,65\,.$$

Hình 2.5 diễn tả dáng điệu của các hàm $J_\rho(x)$ cho các giá trị khác nhau (được chỉ ra phía trên và bên phải của đồ thị) của hàm này trong mặt phẳng $x - \rho$. Khoảng điểm thấp nhất của $J_\rho(x)$ với $\rho = 0,65$ là 3,3, giá trị tiếp theo là 6,6. Như vậy với $\alpha \approx 3,3$, hệ có một trạng thái liên kết $l = 0$ mà tương ứng với nó

$$g^2/\hbar c = \hbar\alpha^2/4Mcd = mc^2\alpha^2/4Mc^2 \approx 0,41\,,$$

là một hằng số không có thứ nguyên.

(c) Với $\alpha \approx 6,6$, hệ có thêm một trạng thái liên kết $l = 0$ nữa. Như vậy, giá trị cực tiểu của α cho hai trạng thái liên kết $l = 0$ là 6,6, tương ứng với

$$(g^2/\hbar c)_{\min} = mc^2\alpha^2_{\min}/4Mc^2 \approx 1,62\,.$$

2017

Hãy chứng minh rằng bất kì một trạng thái riêng liên kết nào của một đơn hạt, hệ thức dưới đây đều được thoả mãn trong cơ học lượng tử phi tương đối tính đối với một trường thế xuyên tâm $V(r)$,

$$|\psi(0)|^2 = \frac{m}{2\pi}\left\langle \frac{dV(r)}{dr}\right\rangle - \frac{1}{2\pi}\left\langle \frac{L^2}{r^3}\right\rangle,$$

ở đây $\psi(0)$ là hàm sóng tại gốc, m là khối lượng của hạt, và L^2 là bình phương của toán tử mômen xung lượng quỹ đạo (đặt $\hbar = 1$). Hãy đưa ra một cách giải thích cổ điển về phương trình này đối với trường hợp mômen xung lượng $\neq 0$.

(*Columbia*)

Lời giải:

(a) Trong trường lực xuyên tâm, phương trình Schrödinger có dạng

$$-\frac{1}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{L^2}{r^2}\right]\psi + V(r)\psi = E\psi\,.$$

Đặt

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{r}\,u(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)\,,$$

ở đây $u(r) = rR(r)$, đối với chuyển động xuyên tâm, ta có

$$u'' + \left\{2m\,[E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}u = 0, \quad (r > 0)\,.$$

Nhân hai vế của phương trình trên với $u'(r)$ và lấy tích phân từ $r = 0$ đến $r = \infty$, ta được

$$\int u'(r)\,u''(r)\,dr + \int\left\{2m\,[E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\left(\frac{1}{2}u^2(r)\right)'dr = 0\,.$$

Đối với các trạng thái riêng ta có thể giả thiết $u'(\infty) = 0,\ u(\infty) = u(0) = 0$. Với $u'(0) = [R(r) + rR'(r)]_{r=0} = R(0)$, tích phân từng phần dẫn đến

$$-\frac{1}{2}R^2(0) + \frac{1}{2}\left[2m\int R^2\frac{dV(r)}{dr}r^2\,dr - \int\frac{2l(l+1)}{r^3}R^2\,rdr\right] = 0\,.$$

Như vậy

$$\begin{aligned}|\psi(0)|^2 &= \frac{1}{4\pi}R^2(0)\\ &= \frac{m}{2\pi}\int[R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)]\frac{dV(r)}{dr}[R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)]r^2drd\Omega\\ &\quad - \frac{1}{2\pi}\int[R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)]\frac{\hat{L}^2}{r^3}[R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)]r^2drd\Omega\,,\end{aligned}$$

hoặc

$$|\psi(0)|^2 = \frac{m}{2\pi}\left\langle\frac{dV(r)}{dr}\right\rangle - \frac{1}{2\pi}\left\langle\frac{\hat{L}^2}{r^3}\right\rangle.$$

(b) Đối với $l \neq 0$, $|\psi(0)|^2 = 0$, và như vậy

$$\left\langle\frac{dV(r)}{dr}\right\rangle = \frac{1}{m}\left\langle\frac{\hat{L}^2}{r^3}\right\rangle.$$

Biểu thức cổ điển tương ứng của nó là

$$\frac{d}{dr}V(r) = \frac{1}{m}\frac{L^2}{r^3}\,.$$

ở đây $F_r = -\frac{dV(r)}{dr}$ là lực hướng tâm, và

$$\begin{aligned}\frac{1}{m}\frac{L^2}{r^3} &= m\frac{|\mathbf{r}\times\mathbf{v}|^2}{r^3} = m\frac{1}{r}(v\sin\angle\mathbf{r},\mathbf{v})^2 = m\frac{v_t^2}{r}\,,\\ &= ma_r\,,\end{aligned}$$

ở đây v_t là vận tốc tiếp tuyến theo mặt cầu của r, bằng khối lượng nhân với gia tốc hướng tâm $a_r = \frac{v_t^2}{r}$. Như vậy, phương trình này biểu thị định luật thứ hai của Newton.

2018

Một hạt spin bằng không có khối lượng m được đưa vào một hố thế hút đối xứng cầu ba chiều bán kính r_0.

(a) Xác định độ sâu tối thiểu cần thiết của hố thế để có hai trạng thái liên kết với mômen xung lượng bằng không góc bằng không?

(b) Với một thế năng có độ sâu như vậy, các trị riêng của Hamiltonian với mômen xung lượng bằng không sẽ bằng bao nhiêu? (Nếu cần bạn có thể giải thích một phần câu hỏi qua việc giải một phương trình siêu việt.)

(c) Nếu hạt ở trạng thái cơ bản, hãy vẽ hàm sóng và phân bố xác suất tương ứng theo tọa độ. Giải thích cặn kẽ ý nghĩa vật lý của phân bố xác suất đó.

(d) Dự đoán kết quả của một phép đo đơn lẻ về động năng của hạt thông qua hàm sóng này. Bạn có thể diễn giải dự đoán của mình qua các tích phân xác định một chiều.

(e) Trên cơ sở nguyên lý bất định, hãy chỉ ra một mối liên hệ định tính giữa câu (c) và câu (d).

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Thế hút có thể được biểu diễn bởi $V = -V_0$, ở đây V_0 là một hằng số dương. Đối với các trạng thái liên kết $0 > E > -V_0$. Như vậy với $l = 0$ hàm sóng xuyên tâm $R(r) = \chi(r)/r$ thỏa mãn các phương trình

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2} - V_0\chi = E\chi, \qquad (0 < r < r_0)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2} = E\chi, \qquad (r_0 < r < \infty)$$

với $\chi(0) = 0$ và $\chi(\infty)$ hữu hạn. Để phù hợp với các điều kiện này hàm sóng có thể được chọn như sau

$$\chi(r) = \sin\alpha r, \qquad 0 < r < r_0,$$

$$\chi(r) = B\exp(-\beta r), \qquad r_0 < r < \infty,$$

ở đây $\alpha = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}$, $\beta = \frac{1}{\hbar}\sqrt{-2mE}$.

Từ điều kiện biên tại $r = r_0$, χ và χ' phải liên tục, ta nhận được $-\alpha\cot\alpha r_0 = \beta$. Định nghĩa $\xi = \alpha r_0$, $\eta = \beta r_0$, ta có

$$\xi^2 + \eta^2 = 2mV_0 r_0^2/\hbar^2,$$

$$-\xi\cot\xi = \eta.$$

Mỗi một cặp số dương ξ, η thỏa mãn các phương trình này cho một trạng thái liên kết. Ví dụ, trong Hình 2.6, đường cong 1 biểu thị $\eta = -\xi\cot\xi$ và

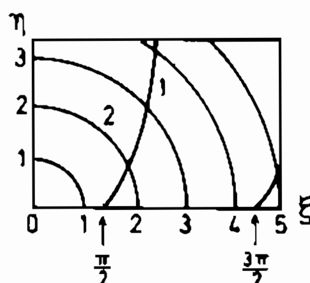
đường cong 2 biểu thị $\xi^2 + \eta^2 = 2^2$. Như chỉ ra trên hình vẽ, với một giá trị cho trước của V_0, để có hai giao điểm trong cung phần tư này ta cần

$$\frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2} \geq \left(\frac{3\pi}{2}\right)^2 ,$$

hay

$$V_0 \geq \frac{9\pi^2\hbar^2}{8mr_0^2} ,$$

đó là độ sâu tối thiểu cần thiết để có hai trạng thái liên kết với mômen xung lượng bằng không.



Hình 2.6

(b) Với một thế năng có độ sâu thỏa mãn điều kiện như trên, một giao điểm xuất hiện tại $\eta = 0$, tương ứng với nó $\beta = \sqrt{-2mE} = 0$, tức là $E = 0$. Một giao điểm khác xuất hiện tại $\xi^2 + \eta^2 = (\frac{3\pi}{2})^2$, nghĩa là, $\xi = \frac{3\pi}{2}\sqrt{1 - (\frac{2\beta r_0}{3\pi})^2}$, và $-\xi \cot \xi = \eta$, tức là,

$$-\frac{1}{r_0}\left(\frac{3\pi}{2}\right)\sqrt{1 - \left(\frac{2\beta r_0}{3\pi}\right)^2} \cot \left[\frac{3\pi}{2}\sqrt{1 - \left(\frac{2\beta r_0}{3\pi}\right)^2}\right] = \beta .$$

Giải phương trình tìm β, ta thu được trị riêng thứ hai của Hamiltonian,

$$E = -\frac{\beta^2\hbar^2}{2m} .$$

(c) Đặt hàm sóng chuẩn hóa ở trạng thái cơ bản là

$$\chi(r) = A \sin \alpha r, \qquad 0 \leq r \leq r_0 ,$$
$$\chi(r) = A \sin \alpha r_0 \exp[\beta(r_0 - r)], \quad r > r_0 ,$$

ta có

$$4\pi \int_0^\infty R^2 r^2\, dr = 4\pi \int_0^\infty u^2\, dr$$
$$= 4\pi A^2 \int_0^{r_0} \sin^2 \alpha r\, dr + 4\pi A^2 \sin^2 \alpha r e^{2\beta r_0}$$
$$\times \int_{r_0}^\infty e^{-2\beta r}\, dr = 1,$$

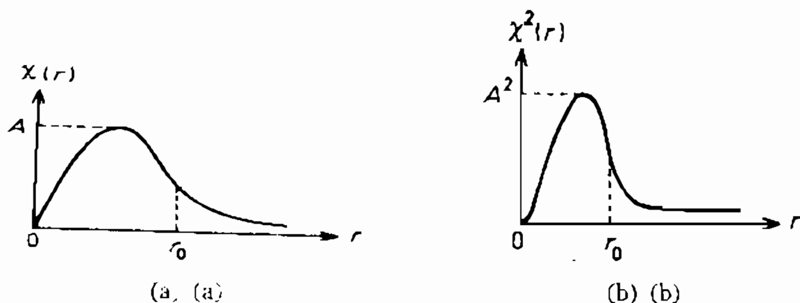
hay

$$\frac{1}{4\pi A^2} = \frac{1}{2\alpha}\left(\alpha r_0 - \sin \alpha r_0 \cos \alpha r_0\right) + \frac{1}{2\beta} \sin^2 \alpha r_0 .$$

Hàm sóng và phân bố xác suất được biểu diễn tương ứng trên Hình 2.7(a) và 2.7(b).

Ta có thể thấy rằng xác suất để tìm thấy hạt là rất lớn với $r < r_0$ và nó suy giảm theo hàm e mũ với $r > r_0$, ta có thể xem như hạt bị giữ trong hố thế vuông góc.

(d) Động năng của hạt, $E_T = p^2/2m$, là một hàm phụ thuộc hoàn toàn vào xung lượng p; như vậy xác suất tìm thấy một giá trị động năng nhất định bởi một phép đo đơn lẻ sẽ bằng xác suất tìm thấy xung lượng tương ứng p, $|\psi(\mathbf{p})|^2$. Ở đây, $\psi(\mathbf{p})$ là ảnh Fourier của hàm sóng tọa độ ở trạng thái cơ bản,



(a) (a) (b) (b)

Hình 2.7

$$|\psi(p)|^2 = |\psi(\mathbf{p})|^2 = \left| \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi(r)}{r} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d\mathbf{r} \right|^2$$
$$= \frac{1}{4\pi(2\pi\hbar)^3} \left| \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\chi(r)}{r} e^{-ipr\cos\theta/\hbar} \sin\theta d\theta d\varphi r^2\, dr \right|^2$$

$$= \frac{1}{2\pi^2\hbar^3}\left| \int_0^\infty \frac{\chi(r)}{r} \frac{\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}{\left(\frac{pr}{\hbar}\right)} r^2\, dr \right|^2 .$$

Tích phân có thể bị ảnh hưởng khi biểu thức của $\chi(r)$ trong câu (c) được thế vào biểu thức dưới dấu tích phân. Động năng trung bình $\bar{E}_T$ là

$$\bar{E}_T = \left\langle \psi_1 \left| \frac{p^2}{2m} \right| \psi_1 \right\rangle = E_1 - \langle \psi_1 | V | \psi_1 \rangle$$

$$= E_1 + V_0 \int_0^{r_0} A^2 \sin^2 \alpha r \cdot \frac{1}{r^2} \cdot 4\pi r^2\, dr$$

$$= E_1 + 2\pi V_0 A^2 \left(r_0 - \frac{\sin 2\alpha r_0}{2\alpha} \right) .$$

(e) Từ trên ta thấy rằng hàm sóng theo các tọa độ không gian trong câu (c) cho ta phân bố xác suất không gian, trong khi hàm sóng trong không gian xung lượng trong câu (d) cho phân bố xác suất theo xung lượng. Tích của các độ bất định của một phép đo đồng thời vị trí và xung lượng phải thỏa mãn nguyên lý bất định

$$\Delta p \Delta r \geq \hbar/2 .$$

Điều này nói lên rằng, hai đại lượng này bổ sung cho nhau.

2019

(a) Cho thế năng một chiều (Hình 2.8)

$$V = -V_0, \quad |x| < a ,$$
$$V = 0, \quad |x| > a ,$$

hãy chỉ ra rằng luôn có ít nhất một trạng thái liên kết cho các thế hút $V_0 > 0$. (Bạn có thể giải điều kiện trị riêng bằng phương pháp đồ thị.)

(b) So sánh phương trình Schrödinger cho trường hợp một chiều ở trên và cho phần xuyên tâm $U(r)$ của hàm sóng ba chiều khi $L = 0$,

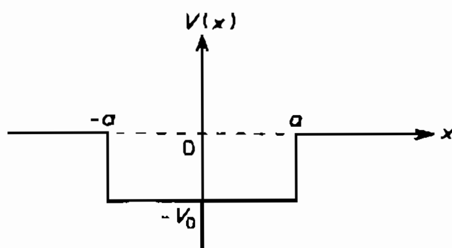
$$\psi(\mathbf{r}) = r^{-1} U(r)\, Y_{LM}(\Omega) ,$$

ở đây $\psi(\mathbf{r})$ là nghiệm của phương trình Schrödinger cho thế năng

$$V = -V_0, \quad r < a ,$$
$$V = 0, \quad r > a .$$

Tại sao không phải lúc nào cũng có trạng thái liên kết với $V_0 > 0$ trong trường hợp ba chiều?

(*MIT*)



Hình 2.8

Lời giải:

(a) Đối với trạng thái liên kết của một hạt, $E < 0$. Với $|x| > a$, $V = 0$ và phương trình Schrödinger

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

có các nghiệm

$$\psi(x) = \begin{cases} A\,e^{-k'x}, & x > a, \\ B\,e^{k'x}, & x < -a, \end{cases}$$

ở đây

$$k' = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\,.$$

Với $|x| < a$, và phương trình Schrödinger

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)\,\psi = 0$$

có các nghiệm

$$\psi(x) \sim \cos kx, \quad \text{(hàm chẵn)}$$
$$\psi(x) \sim \sin kx, \quad \text{(hàm lẻ)}$$

ở đây

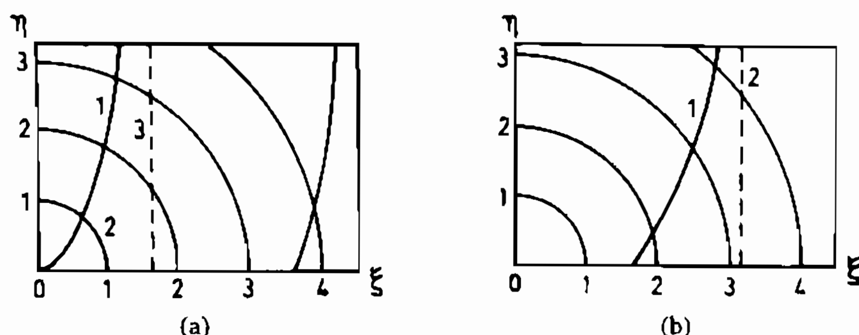
$$k = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}}\,,$$

với $E > -V_0$. Ở đây ta chỉ cần xét các trạng thái có tính chẵn bao gồm cả trạng thái cơ bản.

Tính liên tục của hàm sóng và đạo hàm của nó tại $x = \pm a$ đòi hỏi $k \tan ka = k'$. Đặt $ka = \xi$, $k'a = \eta$. Do đó, các phương trình dưới đây xác định các mức năng lượng của các trạng thái liên kết

$$\xi \tan \xi = \eta,$$
$$\xi^2 + \eta^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2.$$

Các phương trình này nói chung phải được giải bằng phương pháp đồ thị. Trong Hình 2.9(a), đường 1 là đồ thị của $\eta = \xi \tan \xi$, và đường 2 là đồ thị của $\xi^2 + \eta^2 = 1$. Đường đứt đoạn 3 là đường tiệm cận của đường thứ nhất với $\xi = \pi/2$. Do đường 1 đi qua gốc tọa độ nên sẽ có ít nhất là một nghiệm bất kể V_0a^2 nhỏ như thế nào. Như vậy, sẽ luôn có ít nhất một trạng thái liên kết cho hố thế vuông đối xứng một chiều.



Hình 2.9

(b) Với $r > a$, phương trình Schrödinger xuyên tâm

$$\frac{d^2U}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}U = 0,$$

có nghiệm $U(r) = A\exp(-\kappa' r)$, ở đây

$$\kappa' = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Với $r < a$, phương trình là

$$\frac{d^2U}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)U = 0$$

và nghiệm thỏa mãn điều kiện liên kết $U(r)\xrightarrow{r\to 0}0$ là $U(r) = B\sin\kappa r$, ở đây

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}}\,.$$

Tính liên tục của hàm sóng và đạo hàm của nó tại $r = a$ đòi hỏi $\kappa\cot\kappa a = -\kappa'$. Đặt $\kappa a = \xi$, $\kappa' a = \eta$ ta được

$$\xi\cot\xi = -\eta\,,$$
$$\xi^2 + \eta^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2\,.$$

Đây một lần nữa lại được giải bằng phương pháp đồ thị. Trên Hình 2.9(b) đường 1 biểu thị $\xi\cot\xi = -\eta$, và đường đứt đoạn 2 là tiệm cận $\xi = \pi$. Có thể thấy rằng chỉ khi

$$\xi^2 + \eta^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2 \geq \left(\frac{\pi}{2}\right)^2\,,$$

hay

$$V_0a^2 \geq \pi^2\hbar^2/8m\,,$$

thì các phương trình mới có nghiệm. Như vậy, khác với trường hợp một chiều, chỉ khi $V_0a^2 \geq \pi^2\hbar^2/8m$ thì mới có trạng thái liên kết.

2020

(a) Xét một hạt có khối lượng m chuyển động trong một hố thế vuông góc ba chiều $V(|\mathbf{r}|)$. Hãy chỉ ra rằng với một hố có bán kính R cố định, trạng thái liên kết chỉ tồn tại nếu hố có một độ sâu cực tiểu nào đó. Hãy tính giá trị độ sâu tối thiểu đó.

(b) Bài toán tương tự trong không gian một chiều dẫn đến một câu trả lời khác. Câu trả lời đó là như thế nào?

(c) Bạn có thể chỉ ra rằng bản chất chung của các câu trả lời (a) và (b) ở trên vẫn được giữ nguyên cho một hố thế có hình dạng bất kì hay không? Ví dụ, trong trường hợp một chiều trong câu (b)

$$\begin{aligned} V(x) &= \lambda f(x) < 0, \quad a \leq x \leq b\,,\\ V(x) &= 0, \qquad\qquad x < a \quad \text{hoặc} \quad x > b\,,\end{aligned}$$

xét các giá trị λ khác nhau trong khi giữ nguyên hàm $f(x)$ không đổi.

(*CUSPEA*)

Lời giải:

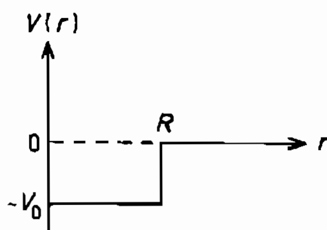
(a) Giả thiết rằng có một trạng thái liên kết $\psi(\mathbf{r})$ và nó là trạng thái cơ bản ($l = 0$), sao cho $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r)$. Phương trình tìm hàm riêng, trị riêng là

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\psi(r)\right) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)\,,$$

ở đây $E < 0$, và

$$V(r) = 0, \qquad r > R,$$
$$V(r) = -V_0, \quad 0 < r < R,$$

với $V_0 > 0$, như chỉ ra trên Hình 2.10. Nghiệm của phương trình trên là



Hình 2.10

$$\psi(r) = \begin{cases} A\sin(kr)/r, & r < R, \quad k = \sqrt{\dfrac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}\,, \\ B\,e^{-k'r}/r, & r > R, \quad k' = \sqrt{\dfrac{-2mE}{\hbar^2}}\,, \end{cases}$$

ở đây A và B là các hằng số chuẩn hóa. Tính liên tục của ψ và ψ' tại $r = R$, hoặc tương đương

$$[\ln(r\psi(r))]'_{r=R^-} = [\ln(r\psi(r))]'_{r=R^+}\,,$$

dẫn đến

$$k\cot(kR) = -k'\,,$$

trong khi các định nghĩa của k, k' yêu cầu

$$k^2 + k'^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\,.$$

Các phương trình này có thể được giải bằng phương pháp đồ thị như trong **Bài tập 2018**. Tương tự, ta có thể chỉ ra rằng để có ít nhất một trạng thái liên kết ta cần

$$\frac{2mV_0R^2}{\hbar^2} \geq \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 ,$$

tức là,

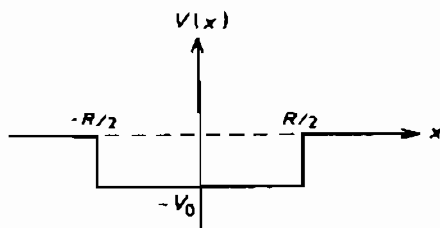
$$V_0 \geq \frac{\pi^2\hbar^2}{8mR^2} .$$

(b) Nếu thế năng là một thế chữ nhật một chiều, thì bất kể hố sâu bao nhiêu vẫn luôn tồn tại một trạng thái liên kết. Trạng thái cơ bản luôn đối xứng qua gốc và là tâm hố. Phương trình riêng là

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0 ,$$

ở đây, như được chỉ ra trên Hình 2.11,

$$\begin{aligned} &V(x) = -V_0, \quad (V_0 > 0), \quad |x| < R/2 , \\ &V(x) = 0, \qquad\qquad\qquad\quad |x| > R/2 . \end{aligned}$$



Hình 2.11

Đối với các trạng thái liên kết, ta cần $0 > E > -V_0$. Do $V(x) = V(-x)$, phương trình có nghiệm là

$$\psi(x) = \begin{cases} A\cos(kx), & |x| < \dfrac{R}{2} , \\ B e^{-k'|x|}, & |x| > \dfrac{R}{2} , \end{cases}$$

ở đây k, k' có cùng định nghĩa như trong câu (a). Tính liên tục của ψ và ψ' tại $x = \frac{R}{2}$ dẫn đến

$$\tan(kR/2) = k'/k .$$

hay

$$\sec^2(kR/2) = \frac{V_0}{E + V_0}.$$

tức là,

$$\cos(kR/2) = \pm\sqrt{\frac{E + V_0}{V_0}}.$$

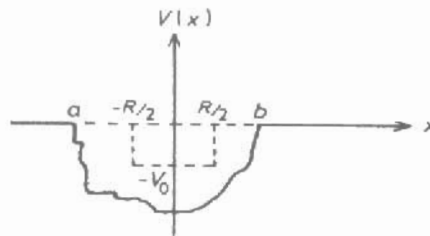
Do $V_0 > -E > 0$, nên phương trình trên luôn có nghiệm, tức là luôn tồn tại một trạng thái liên kết đối với bất kì giá trị nào của V_0.

(c) Đối với một hố thế một chiều có hình dạng bất kì, ta luôn có thể định nghĩa một hố thế chữ nhật $V_s(x)$ sao cho

$$\begin{aligned} V_s(x) &= -V_0, \quad |x| < R/2, \\ V_s(x) &= 0, \quad\quad |x| > R/2, \end{aligned}$$

và ta luôn có $-V_0 \geq V(x)$ (xem Hình 2.12). Từ (b) ta thấy rằng luôn tồn tại một hàm $|\psi_0(x)\rangle$ là một trạng thái liên kết của $V_s(x)$, đối với nó

$$\left\langle \psi_0 \left| \frac{p^2}{2m} + V_s(x) \right| \psi_0 \right\rangle < 0.$$



Hình 2.12

Do

$$\left\langle \psi_0 \left| \frac{p^2}{2m} + V(x) \right| \psi_0 \right\rangle < \left\langle \psi_0 \left| \frac{p^2}{2m} + V_s(x) \right| \psi_0 \right\rangle,$$

ta có

$$\left\langle \psi_0 \left| \frac{p^2}{2m} + V(x) \right| \psi_0 \right\rangle < 0.$$

Điều này có nghĩa rằng luôn tồn tại một trạng thái liên kết đối với một hố thế một chiều có hình dáng bất kì.

2021

Hãy tính hàm Green đối với một electron phi tương đối tính trong thế năng

$$\begin{aligned} V(x, y, z) &= \infty, \quad x \leq 0, \quad (y, z \text{ bất kì}) \\ V(x, y, z) &= 0, \quad x > 0, \quad (y, z \text{ bất kì}) \end{aligned}$$

và đánh giá $|G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)|^2$. Hãy mô tả sự biến đổi theo thời gian của hàm xác suất và giải thích nguyên nhân vật lý của sự biến đổi này.

(*Berkeley*)

Lời giải:

Thế năng trong bài toán này có thể được thay thế bằng một điều kiện biên $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = 0$ và $x = 0$. Bài toán điều kiện biên này có thể được giải bằng phương pháp ảnh. Giả thiết $\mathbf{r}''$ là ảnh của electron tại $\mathbf{r}'$ quanh giá trị $x = 0$. Khi đó

$$(i\hbar\partial_t - H)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \delta(t)\left[\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')\right]. \quad (1)$$

Hàm Green bằng không với $x \leq 0$ và với $x \geq 0$ thì nó bằng phần ứng với $x > 0$ của nghiệm của phương trình (1). Đặt

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t}\, \bar{G}(\mathbf{k}, \mathbf{r}', \omega)\, d\omega. \quad (2)$$

ta có $i\hbar\partial_t G = \hbar\omega G$ và $H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Thế (2) vào (1), ta có

$$\bar{G}(\mathbf{k}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}''}\right). \quad (3)$$

Thế ngược lại (3) vào (2), ta được

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int_{\Gamma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} \frac{\left(e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}''}\right)}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}\, d\omega. \quad (4)$$

Trước hết ta lấy tích phân theo ω. Đường Γ được chọn để thỏa mãn điều kiện nhân quả. Tính nhân quả yêu cầu rằng $t < 0, G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = 0$. Trước hết

đặt cực điểm của ω xê dịch đi một chút, tức là một lượng $-i\varepsilon$, ở đây ε là một số dương nhỏ. Cuối cùng cho $\varepsilon \to 0$, ta được

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \frac{-i}{\hbar(2\pi)^3} \int \exp\left(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\left(e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}''}\right) d^3k$$

$$= \frac{1}{\hbar}\left[\frac{m}{2\pi\hbar t}\right]^{3/2}\left\{\exp\left[\frac{im(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{2\hbar t}\right] - \exp\left[\frac{im(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')^2}{2\hbar t}\right]\right\}. \quad (5)$$

Như vậy khi cả x và t lớn hơn không, hàm Green được tính bởi (5); còn không thì nó bằng không. Khi $x > 0$ và $t > 0$,

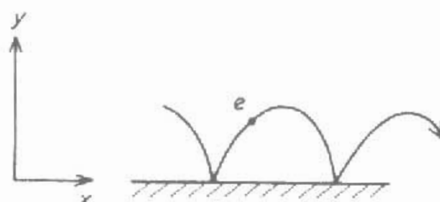
$$|G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left[\frac{m}{2\pi\hbar t}\right]^3$$
$$\times \left\{2 - 2\,Re \exp\left(\frac{im}{2\hbar t}\left[\mathbf{r}'^2 - \mathbf{r}''^2 - 2\mathbf{r}\cdot(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')\right]\right)\right\}.$$

Nếu không có số hạng thế năng $V(x, y, z)$, thì hàm Green đối với không gian tự do, $|G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)|^2$, sẽ tỉ lệ với t^{-3}. Nhưng do sự có mặt của bức tường phản xạ, số hạng giao thoa xuất hiện.

2022

Một electron chuyển động trên một bề mặt dẫn không xuyên qua được. Nó bị hút về bề mặt này bởi điện tích ảnh của bản thân nó sao cho về mặt cổ điển nó nẩy lên xuống như trong Hình 2.13.

(a) Hãy viết phương trình Schrödinger cho các trạng thái riêng năng lượng và các trị riêng năng lượng của electron. (Gọi y là khoảng cách trên bề mặt.) Bỏ qua các hiệu ứng quán tính của ảnh.



Hình 2.13

(b) Sự phụ thuộc của các trạng thái riêng vào x và z như thế nào?

(c) Các điều kiện biên còn lại là gì?

(d) Hãy tìm trạng thái cơ bản và năng lượng của nó?

[Gợi ý: Các đại lượng trên có liên hệ gần gũi với các đại lượng tương tự trong nguyên tử hydro thông thường].

(e) Viết tập hợp đầy đủ của các trị riêng năng lượng liên tục và/hoặc rời rạc?

(Columbia)

Lời giải:

(a) Hình 2.14 chỉ ra electron và ảnh của nó. Tương ứng, năng lượng điện của hệ là $V(r) = \frac{1}{2}\sum_i q_i V_i = \frac{1}{2}\left[e \cdot \frac{-e}{2y} + (-e) \cdot \frac{e}{2y}\right] = -e^2/4y$. Phương trình Schrödinger như vậy sẽ là

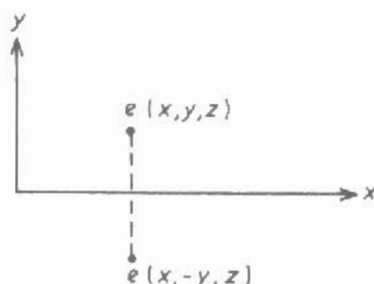
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4y}\right)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z).$$

(b) Tách các biến bằng cách giả thiết rằng các nghiệm có dạng

$$\psi(x, y, z) \equiv \psi_n(y)\,\phi(x, z) \equiv \psi_n(y)\,\phi_x(x)\,\phi_z(z),$$

ta có thể viết các phương trình trên thành

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2}\psi_n(y) - \frac{e^2}{4y}\psi_n(y) = E_y\psi_n(y), \tag{1}$$



Hình 2.14

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi_x(x) = \frac{p_x^2}{2m}\phi_x(x),$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}\phi_z(z) = \frac{p_z^2}{2m}\phi_z(x),$$

với

$$E_y + \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} = E\,.$$

Chú ý rằng do $V(y) = -\frac{e^2}{4y}$ chỉ phụ thuộc vào y, nên p_x và p_z là các hằng số chuyển động. Như vậy

$$\phi(x,\, z) \equiv \phi_x(x)\,\phi_z(z) \sim e^{i(p_x x + p_z z)/\hbar}\,,$$

và

$$\psi(x,\, y,\, z) \equiv \psi_n(y)\, e^{i(p_x x + p_z z)/\hbar}\,.$$

(c) Điều kiện biên còn lại là $\psi(x,\, y,\, z) = 0$ với $y \le 0$.

(d) Bây giờ hãy xét một nguyên tử hydro có điện tích hạt nhận Z. Phương trình Schrödinger theo hướng bán kính là

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{1}{r^2}\,\frac{d}{dr}\left(r^2\,\frac{dR}{dr}\right) - \frac{Ze^2}{r}\,R + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\,R = ER\,.$$

Bằng cách đặt $R = \chi/r$, phương trình trên trở thành

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2\chi}{dr^2} - \frac{Ze^2}{r}\,\chi + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\,\chi = E\chi\,.$$

Đặc biệt khi $l = 0$ ta có

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2\chi}{dr^2} - \frac{Ze^2}{r}\,\chi = E\chi\,, \qquad (2)$$

phương trình này đồng nhất với (1) chỉ cần thay $r \to y$, $Z \to \frac{1}{4}$. Như vậy các nghiệm của (1) đơn giản là y nhân với các hàm sóng xuyên tâm của trạng thái cơ bản của nguyên tử. Như vậy

$$\psi_1(y) = yR_{10}(y) = 2y\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zy/a}\,,$$

ở đây $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$. Với $Z = \frac{1}{4}$, ta có

$$\psi_1(y) = 2y\,\left(\frac{me^2}{4\hbar^2}\right)^{3/2}\,\exp\left[-\frac{me^2 y}{4\hbar^2}\right]\,.$$

Chú ý rằng điều kiện biên ở (c) được thỏa mãn bởi hàm sóng này. Năng lượng trạng thái cơ bản gây bởi chuyển động theo phương y thu được một cách tương tự

$$E_y = -\frac{Z^2 me^4}{2\hbar^2} = -\frac{me^4}{32\hbar^2}$$

(e) Trị riêng năng lượng đầy đủ đối với trạng thái lượng tử n là

$$E_{n,p_x,p_z} = -\frac{me^4}{32\hbar^2 n^2} + \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_z^2), \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

với hàm sóng

$$\psi_{n,p_x,p_z}(\mathbf{r}) = AyR_{n0}(y)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)\right],$$

ở đây A là hằng số chuẩn hóa.

2023

Một electron phi tương đối tính chuyển động trong vùng bên trên một vật dẫn phẳng rộng nối đất. Electron bị hút bởi điện tích ảnh của nó nhưng không thể xuyên qua được bề mặt của vật dẫn.

(a) Hãy viết Hamiltonian thích hợp cho chuyển động ba chiều của electron này. Hàm sóng của electron phải thỏa mãn các điều kiện biên nào?

(b) Hãy tìm các mức năng lượng của electron.

(c) Đối với trạng thái năng lượng thấp nhất, hãy tìm khoảng cách trung bình của electron bên trên bề mặt vật dẫn.

(Columbia)

Lời giải:

(a) Chọn hệ tọa độ Đềcác với gốc trên bề mặt vật dẫn vuông góc với phương z sao cho vật dẫn chiếm nửa không gian $z \leq 0$. Như trong **Bài tập 2022**, electron chịu một tương tác với thế năng $V(z) = -\frac{e^2}{4z}$. Như vậy Hamiltonian là

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_y^2) - \frac{e^2}{4z}$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - \frac{e^2}{4z}.$$

Hàm sóng của electron thỏa mãn điều kiện biên $\psi(x, y, z) = 0$ với $z \leq 0$.

(b) Như chỉ ra trong **Bài tập 2022**, các trị riêng năng lượng là

$$E_n = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) - \frac{me^4}{32\hbar^2}\frac{1}{n^2}. \quad (n = 1, 2, 3 \ldots)$$

(c) Trạng thái cơ bản có năng lượng

$$E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) - \frac{me^4}{32\hbar^2},$$

và hàm sóng

$$\psi_{100}(x, y, z) = \frac{Az}{a'^{3/2}} e^{-z/a'},$$

ở đây

$$a' = \frac{4\hbar^2}{me^2},$$

và A là hằng số chuẩn hóa. Do đó

$$\begin{aligned}
\langle z \rangle &= \frac{\int \psi_{100}^* z \psi_{100}\, dx\, dy\, dz}{\int \psi_{100}^* \psi_{100}\, dx\, dy\, dz} \\
&= \frac{\int_0^\infty z^3 e^{-2z/a'}\, dz}{\int_0^\infty z^2 e^{-2z/a'}\, dz} \\
&= \frac{3!}{(\frac{2}{a'})^4} \cdot \frac{(\frac{2}{a'})^3}{2!} \\
&= \frac{3}{2} a' = \frac{6\hbar^2}{me^2}.
\end{aligned}$$

PHẦN III

SPIN VÀ MÔMEN XUNG LƯỢNG

3001

Xét bốn ma trận Hermite 2 × 2 I, σ_1, σ_2, và σ_3, ở đây I là ma trận đơn vị, và các ma trận còn lại thỏa mãn điều kiện $\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}$.

Bạn phải chứng minh những điều sau mà không được sử dụng các biểu diễn hoặc dạng cụ thể nào của các ma trận:

(a) Chứng minh rằng $Tr(\sigma_i) = 0$.

(b) Chứng minh rằng các trị riêng của σ_i là ± 1 và $\det(\sigma_i) = -1$.

(c) Chứng minh rằng bốn ma trận trên là độc lập tuyến tính và do đó bất kì ma trận 2 × 2 nào cũng có thể được khai triển theo các ma trận đó.

(d) Từ (c) ta biết rằng

$$M = m_0 I + \sum_{i=1}^{3} m_i\sigma_i ,$$

ở đây M là ma trận 2 × 2 bất kì. Hãy suy ra một biểu thức cho m_i $(i = 0, 1, 2, 3)$.

(Buffalo)

Lời giải:

(a) Do

$$\sigma_i\sigma_j = -\sigma_j\sigma_i \quad (i \neq j), \quad \sigma_j\sigma_j = I ,$$

ta có

$$\sigma_i = \sigma_i\sigma_j\sigma_j = -\sigma_j\sigma_i\sigma_j ,$$

và như vậy

$$Tr(\sigma_i) = -Tr(\sigma_j\sigma_i\sigma_j) = -Tr(\sigma_i\sigma_j\sigma_j) = -Tr(\sigma_i) .$$

Do đó $Tr(\sigma_i) = 0$.

(b) Giả thiết σ_i có một vectơ riêng ϕ và trị riêng λ_i, tức là

$$\sigma_i\phi = \lambda_i\phi .$$

Do đó,

$$\sigma_i\sigma_i\phi = \sigma_i\lambda_i\phi = \lambda_i\sigma_i\phi = \lambda_i^2\phi .$$

Mặt khác,

$$\sigma_i \sigma_i \phi = I\phi = \phi .$$

Do đó,

$$\lambda_i^2 = 1 ,$$

hay

$$\lambda_i = \pm 1 .$$

Do

$$Tr(\sigma_i) = \lambda_1 + \lambda_2 = 0 ,$$

nên hai trị riêng của σ_i là $\lambda_1 = +1, \lambda_2 = -1$, và do đó $\mathrm{Det}(\sigma_i) = \lambda_1 \lambda_2 = -1$.

(c) Nếu I, σ_i, $i = 1, 2, 3$, là phụ thuộc tuyến tính thì có thể tìm được bốn hằng số m_0, m_i sao cho chúng thỏa mãn

$$m_0 I + \sum_{i=1}^{3} m_i \sigma_i = 0 .$$

Nhân hai vế với σ_j, ta có

$$m_0 \sigma_j + \sum_{i=1}^{3} m_i \sigma_i \sigma_j = 0 ,$$

và

$$m_0 \sigma_j + \sum_{i=1}^{3} m_i \sigma_j \sigma_i = 0 .$$

Cộng hai phương trình trên dẫn đến

$$2m_0 \sigma_j + \sum_{i \neq j} m_i (\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i) + 2m_j I = 0 ,$$

hay

$$m_0 \sigma_j + m_j I = 0 .$$

Như vậy

$$Tr(m_0 \sigma_j + m_j I) = m_0 \, Tr(\sigma_j) + 2m_j = 0 .$$

Do $Tr(\sigma_j) = 0$, ta sẽ có $m_j = 0$, và do đó $m_0 = 0$. Vì vậy, bốn ma trận I và σ_i là độc lập tuyến tính và bất kì ma trận 2×2 nào đều có thể được khai triển theo các ma trận đó.

(d) Với ma trận 2×2 bất kì M cho trước, ta có thể viết

$$M = m_0 I + \sum_{i=1}^{3} m_i \sigma_i .$$

Để xác định các hệ số m_0, m_i, lấy vết (trace) của ma trận trên

$$Tr(M) = 2m_0 ,$$

hay

$$m_0 = \frac{1}{2} Tr(M) .$$

Xét

$$\sigma_j M = m_0 \sigma_j + \sum_{i=1}^{3} m_i \sigma_j \sigma_i ,$$

và

$$M \sigma_j = m_0 \sigma_j + \sum_{i=1}^{3} m_i \sigma_i \sigma_j .$$

Cộng hai phương trình cuối dẫn đến

$$\sigma_j M + M \sigma_j = 2m_0 \sigma_j + 2m_j I .$$

Như vậy

$$Tr(\sigma_j M + M \sigma_j) = 2 Tr(\sigma_j M) = 4m_j ,$$

hay

$$m_j = \frac{1}{2} Tr(\sigma_j M) .$$

3002

Ba toán tử ma trận đối với spin thỏa mãn $s_x s_y - s_y s_x = i s_z$ và các hoán vị tròn. Hãy chứng tỏ rằng

$$s_z^3 = s_z , \quad (s_x \pm i s_y)^3 = 0 .$$

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Các dạng ma trận của toán tử mômen spin ($s = 1$) trong biểu diễn (s^2, s_z), trong đó s^2, s_z có dạng chéo, là

$$s_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix},$$

$$s_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Tính toán trực tiếp dẫn đến

$$s_z^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = s_z,$$

$$(s_x + i\, s_y)^3 = \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right]^3 = 0,$$

$$(s_x - i\, s_y)^3 = \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} \right]^3 = 0.$$

3003

Ba ma trận M_x, M_y, M_z, mỗi ma trận có 256 hàng và cột, tuân theo các quy tắc giao hoán $[M_x, M_y] = iM_z$ (với các hoán vị vòng quanh của x, y và z). Các trị riêng của ma trận M_x là ± 2, bội 1; $\pm 3/2$, bội 8; ± 1, bội 28; $\pm 1/2$, bội 56; và 0, bội 70. Hãy viết 256 trị riêng của ma trận $M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2$.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

M^2 giao hoán với M_x. Do đó, ta có thể lựa chọn các trạng thái riêng chung $|M, M_x\rangle$. Như vậy

$$M^2 \,|\, M, M_x\rangle = m(m+1)\,|\, M, M_x\rangle,$$

$$M_x \,|\, M, M_x\rangle = m_x \,|\, M, M_x\rangle.$$

Đối với cùng một giá trị m, m_x có thể có các giá trị $+m$, $m-1$, ..., $-m$, trong khi M^2 có trị riêng $m(m+1)$. Như vậy

m	m_x	$M^2 = m(m+1)$	
2	$\left.\begin{matrix}\pm 2\\ \pm 1\\ 0\end{matrix}\right\}$ bội 1	6	$5 \times 1 = 5$ lần
3/2	$\left.\begin{matrix}\pm 3/2\\ \pm 1/2\end{matrix}\right\}$ bội 8	$\frac{15}{4}$	$4 \times 8 = 32$ lần
1	$\left.\begin{matrix}\pm 1\\ 0\end{matrix}\right\}$ bội 27	2	$3 \times 27 = 81$ lần
1/2	$\pm 1/2$ bội 48	$\frac{3}{4}$	$2 \times 48 = 96$ lần
0	0, bội 42	0	$1 \times 42 = 42$ lần
			Tổng cộng 256 giá trị

3004

Một trạng thái $|\psi\rangle$ nào đó là một trạng thái riêng của $\hat{\mathbf{L}}^2$ và $\hat{L}_z$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |\psi\rangle = l(l+1)\hbar^2 |\psi\rangle, \quad \hat{L}_z |\psi\rangle = m\hbar |\psi\rangle .$$

Hãy tính $\langle \hat{L}_x \rangle$ và $\langle \hat{L}_x^2 \rangle$ đối với trạng thái này.

(*MIT*)

Lời giải:

Do $\hat{L}_z$ là một toán tử Hermite, ta có

$$\hat{L}_z |\psi\rangle = m\hbar |\psi\rangle \rightarrow \langle\psi| \hat{L}_z = m\hbar \langle\psi| .$$

Như vậy

$$\langle \hat{L}_x \rangle = \langle\psi| \frac{1}{i\hbar} [\hat{L}_y, \hat{L}_z] |\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle\psi| \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y |\psi\rangle$$
$$= \frac{m\hbar}{i\hbar} (\langle\psi| \hat{L}_y |\psi\rangle - \langle\psi| \hat{L}_y |\psi\rangle) = 0 .$$

Do tính đối xứng theo x, y, ta có

$$\langle \hat{L}_x^2 \rangle = \langle \hat{L}_y^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2 \rangle ,$$

và như vậy

$$\langle \hat{L}_x^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi \,|\, \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2 \,|\, \psi \rangle = \frac{1}{2} \left[l(l+1) - m^2 \right] \hbar^2 \,.$$

Nó cũng có thể được tính bằng cách sử dụng các toán tử tăng và giảm.

3005

Các hàm spin đối với một electron tự do trong một cơ sở ở đó $\hat{s}_z$ được chéo hóa có thể viết dưới dạng $\binom{1}{0}$ và $\binom{0}{1}$ với các trị riêng của $\hat{s}_z$ tương ứng là $+1/2$ và $-1/2$. Sử dụng cơ sở này hãy tìm một hàm riêng chuẩn hóa của $\hat{s}_y$ với trị riêng $-1/2$.

(*MIT*)

Lời giải:

Trong biểu diễn chéo hóa của $\hat{s}^2$, $\hat{s}_z$, ta có thể biểu diễn $\hat{s}_y$ dưới dạng

$$\hat{s}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad (\hbar = 1) \,.$$

Đặt hàm riêng cần có của $\hat{s}_y$ là $\sigma_y = \binom{a}{b}$. Như vậy do

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} ,$$

ta có $a = ib$, và như vậy $\sigma_y = b \binom{i}{1}$.

Chuẩn hóa

$$\sigma_y^+ \sigma_y = b^2 (-i, 1) \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} = 2b^2 = 1 \,,$$

dẫn đến $b = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Như vậy

$$\sigma_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} .$$

3006

Xét một hạt spin bằng không được biểu diễn bằng hàm sóng

$$\psi = K (x + y + 2z) \, e^{-\alpha r} \,,$$

ở đây $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, và K và α là các hằng số thực.

(a) Mômen xung lượng toàn phần của hạt bằng bao nhiêu?

(b) Giá trị kì vọng của thành phần z của mômen xung lượng bằng bao nhiêu?

(c) Nếu thành phần z của mômen xung lượng được đo, thì xác suất để nó có giá trị $L_z = +\hbar$ bằng bao nhiêu?

(d) Tính xác suất để tìm thấy hạt tại θ, ϕ và trong góc khối $d\Omega$? Ở đây θ, ϕ là các góc thường dùng trong tọa độ cầu.

Bạn có thể cần các biểu thức của một số hàm cầu đầu tiên dưới đây:

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}\,, \qquad Y_1^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}\,,$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \quad Y_2^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}\,.$$

(*CUS*)

Lời giải:

Hàm sóng có thể được viết lại trong hệ tọa độ cầu như sau

$$\psi = Kr(\cos\phi\sin\theta + \sin\phi\sin\theta + 2\cos\theta)\, e^{-\alpha r}\,,$$

phần góc của nó là

$$\psi(\theta, \phi) = K'(\cos\phi\sin\theta + \sin\phi\sin\theta + 2\cos\theta)\,,$$

ở đây K' là hằng số chuẩn hóa sao cho

$$K'^2 \int_\theta^\pi d\theta \int_0^{2\pi} \sin\theta\,(\cos\phi\sin\theta + \sin\phi\sin\theta + 2\cos\theta)^2\, d\phi = 1\,.$$

Vì

$$\cos\phi = \frac{1}{2}\,(e^{i\phi} + e^{-i\phi}), \quad \sin\phi = \frac{1}{2i}\,(e^{i\phi} - e^{-i\phi})\,,$$

ta có

$$\psi(\theta, \phi) = K' \left[\frac{1}{2}\,(e^{i\phi} + e^{-i\phi})\sin\theta + \frac{1}{2i}\,(e^{i\phi} - e^{-i\phi})\sin\theta + \cos 2\theta\right]\,,$$

$$= K' \left[-\frac{1}{2}\,(1-i)\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\,Y_1^1 + \frac{1}{2}\,(1+i)\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\,Y_1^{-1} + 2\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,Y_1^0\right].$$

Điều kiện chuẩn hóa và tính trực giao của Y_l^m dẫn đến

$$K'^2\left[\frac{1}{2}\cdot\frac{8\pi}{3}+\frac{1}{2}\cdot\frac{8\pi}{3}+4\cdot\frac{4\pi}{3}\right]=1\,,$$

hay là

$$K'=\sqrt{\frac{1}{8\pi}}\,,$$

và như vậy

$$\psi(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{1}{8\pi}}\left[-\frac{1}{2}(1-i)\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_1^1+\frac{1}{2}(1+i)\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_1^{-1}+2\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_1^0\right].$$

(a) Mômen xung lượng toàn phần của hạt là

$$\sqrt{\langle\mathbf{L}^2\rangle}=\sqrt{l(l+1)}\,\hbar=\sqrt{2}\,\hbar\,.$$

do hàm sóng này ứng với $l=1$.

(b) Thành phần z của mômen xung lượng là

$$\langle\psi^*\,|\,L_z\,|\,\psi\rangle=K'^2\left[\frac{1}{2}\cdot\frac{8\pi}{3}\cdot\hbar(Y_1^1)^2+\frac{1}{2}\cdot\frac{8\pi}{3}(-\hbar)(Y_1^{-1})^2+4\cdot\frac{4\pi}{3}(0)(Y_1^0)^2\right]$$
$$=\frac{1}{8\pi}\left[\frac{1}{2}\cdot\frac{8\pi}{3}(+\hbar)+\frac{1}{2}\cdot\frac{8\pi}{3}(-\hbar)\right]=0\,.$$

(c) Xác suất tìm thấy $L_z=+\hbar$ là

$$P=|\langle L_z=+\hbar\,|\,\psi(\theta,\phi)\rangle|^2=\frac{1}{8\pi}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{8\pi}{3}=\frac{1}{6}\,.$$

(d) Xác suất để tìm thấy hạt trong góc khối $d\Omega$ tại θ,φ là

$$\int\psi^*(\theta,\varphi)\,\psi(\theta,\varphi)\,d\Omega=\frac{1}{8\pi}\left[\sin\theta(\sin\phi+\cos\phi)+2\cos\theta\right]^2d\Omega\,.$$

3007

Một hạt trong trường thế xuyên tâm có mômen quỹ đạo $l = 2\hbar$ và mômen spin $s = 1\hbar$. Hãy tìm các mức năng lượng và các bậc suy biến liên hệ với số hạng tương tác spin - quỹ đạo có dạng $H_{s0} = A\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, với A là một hằng số.

(*MIT*)

Lời giải:

Chọn $\{H, \mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2\}$ là một tập đầy đủ của các biến cơ học. Hàm sóng liên quan với góc và spin là ϕ_{jm_jls}, với nó

$$\mathbf{J}^2\phi_{jm_jls} = \hbar^2 j(j+1)\,\phi_{jm_jls}, \quad \mathbf{L}^2\phi_{jm_jls} = \hbar^2 l(l+1)\,\phi_{jm_jls},$$

$$\mathbf{S}^2\phi_{jm_jls} = \hbar^2 s(s+1)\,\phi_{jm_jls}, \quad J_z\phi_{jm_jls} = \hbar m_j\,\phi_{jm_jls},$$

với

$$H_{s0} = A\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}A(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2),$$

do $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Như vậy, các mức năng lượng và các bậc suy biến tương ứng là

$$E_{s0} = \frac{\hbar^2}{2}A[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

$$= \begin{cases} 2A\hbar^2, & j = 3, \\ -A\hbar^2, & j = 2, \\ -3A\hbar^2, & j = 1, \end{cases}$$

$$d = 2j+1 = \begin{cases} 7, & j = 3, \\ 5, & j = 2, \\ 3, & j = 1. \end{cases}$$

3008

Ta có thể chứng minh rằng các toán tử tăng và giảm đối với mômen xung lượng, $J_\pm = J_x \pm iJ_y$, giao hoán với $\mathbf{J}^2$, và rằng nếu j, m là các trị riêng của $\mathbf{J}$, J_z, thì

$$J_\pm\,|j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\quad |j, m\pm 1\rangle,$$

với các quy ước về pha của các vectơ trạng thái được lựa chọn thích hợp. Sử dụng các tính chất này để biểu thị các trạng thái $|j, m\rangle$ này với $m = l - 1/2$ qua các trạng thái $|l, m_l; s, m_s\rangle$ với $s = 1/2$. (*MIT*)

Lời giải:

Theo lý thuyết liên kết mômen xung lượng, các giá trị cho phép của mômen xung lượng toàn phần là $j = l + 1/2$ và $j = l - 1/2$ với $s = \frac{1}{2}$.

(a) Với $j = l + 1/2$, do $|l + 1/2, l + 1/2\rangle = |l, l; 1/2, 1/2\rangle$, ta có

$$J_- |l + 1/2, l + 1/2\rangle = (L_- + S_-)|l, l; 1/2, 1/2\rangle .$$

Sử dụng các tính chất của J_-, L_- và S_-

$$J_- \left| l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar\sqrt{2l+1} \left| l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right\rangle,$$

$$L_- \left| l, l; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar\sqrt{2l} \left| l, l-1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle,$$

$$S_- \left| l, l; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| l, l; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

trong phương trình trên, ta thu được

$$\left| l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \left| l, l-1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{2l+1}} \left| l, l; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle .$$

(b) Với $j = l - 1/2$, đặt

$$\left| l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right\rangle = a \left| l, l-1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + b \left| l, l; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle .$$

Tính trực giao của các vectơ riêng dẫn đến

$$\left\langle l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right\rangle = 0 , \qquad (1)$$

$$\left\langle l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right\rangle = 1 . \qquad (2)$$

Sử dụng kết quả (a), phương trình (1) có thể được viết thành

$$\left(\sqrt{\frac{2l}{2l+1}}\left\langle l,l-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right| + \sqrt{\frac{1}{2l+1}}\left\langle l,l;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|\right)$$
$$\left(a\left|l,l-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + b\left|l,l;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right)$$
$$= a\sqrt{\frac{2l}{2l+1}} + b\sqrt{\frac{1}{2l+1}} = 0\,.$$

Tương tự, phương trình (2) có thể được viết thành

$$a^2 + b^2 = 1\,.$$

Hai phương trình trên chỉ ra rằng cả a và b đều là số thực và có thể được cho bằng $a = -\sqrt{1/(2l+1)}$, $b = \sqrt{2l/(2l+1)}$. Như vậy

$$\left|l-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}\right\rangle = -\sqrt{\frac{1}{2l+1}}\left|l,l-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$
$$+\sqrt{\frac{2l}{2l+1}}\left|l,l;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle.$$

3009

Giả thiết một electron trong trạng thái được mô tả bằng hàm sóng

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(e^{i\phi}\sin\theta + \cos\theta\right)g(r)\,,$$

ở đây

$$\int_0^\infty |g(r)|^2 r^2\,dr = 1\,,$$

và ϕ, θ tương ứng là góc phương vị và góc cực.

(a) Các kết quả có thể thu được từ một phép đo thành phần L_z của mômen xung lượng của electron ở trạng thái này là như thế nào?

(b) Xác suất thu được từng kết quả trong câu (a) là bao nhiêu?

(c) Giá trị kì vọng của L_z là bao nhiêu?

(Wisconsin)

Lời giải:

(a) Do

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\ Y_{1,\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi},$$

hàm sóng có thể được viết thành

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{3}}\,(-\sqrt{2}\,Y_{11} + Y_{10})\, g(r)\,.$$

Như vậy, các giá trị khả dĩ của L_z là $+\hbar$, 0.

(b) Do

$$\int |\psi|^2 dr = \frac{1}{4\pi}\int_0^\infty |g(r)|^2 r^2 dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} (1+\cos\phi\sin 2\theta)\sin\theta\, d\phi$$
$$= \frac{1}{2}\int_0^\pi \sin\theta d\theta = 1\,,$$

hàm sóng đã cho được chuẩn hóa. Mật độ xác suất khi đó được tính bởi $P = |\psi|^2$. Như vậy, xác suất để $L_z = +\hbar$ là $(\sqrt{\frac{2}{3}})^2$ hoặc bằng $2/3$ và của $L_z = 0$ là $(\frac{1}{\sqrt{3}})^2$ hay $1/3$.

(c)

$$\int \psi^* L_z \psi r^2 \sin\theta d\theta d\phi dr = \int \left[\sqrt{\frac{1}{3}}\,(-\sqrt{2}\,Y_{11} + Y_{10})\right]^*$$
$$\times \hat{L}_z \left[\sqrt{\frac{1}{3}}\,(-\sqrt{2}\,Y_{11} + Y_{10})\right]$$
$$\times |g(r)|^2 r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$
$$= \frac{2}{3}\hbar\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} Y_{11}^2\, d\phi = \frac{2}{3}\hbar\,.$$

3010

Nếu $U(\beta, \hat{y})$ chỉ phép quay một góc β quanh trục y, hãy chứng minh rằng các phần tử ma trận

$$\langle j, m\,|\,U(\beta, \hat{y})\,|\,j, m'\rangle\,, \quad -j \le m, m' \le j\,,$$

là các đa thức bậc $2j$ đối với các biến $\sin(\beta/2)$ và $\cos(\beta/2)$. Ở đây, $|j, m\rangle$ chỉ một trạng thái riêng của bình phương và thành phần theo phương z của mômen xung lượng

$$\hat{j}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle ,$$

$$\hat{j}_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle .$$

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Ta sử dụng phương pháp quy nạp toán học. Nếu $j = 0$, thì $m = m' = 0$ và phát biểu này hiển nhiên là đúng. Nếu $j = 1/2$, đặt

$$\hat{j}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y \equiv \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} .$$

Xét các ma trận Pauli σ_k, ở đây $k = x$, y hoặc z. Do

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} ,$$

là ma trận đơn vị, ta có với α =hằng số

$$\begin{aligned} \exp(\pm i\alpha\sigma_k) &= 1 \pm \frac{i\alpha\sigma_k}{1!} + \frac{(\pm i\alpha\sigma_k)^2}{2!} + \frac{(\pm i\alpha\sigma_k)^3}{3!} + \cdots \\ &= \left(1 - \frac{\alpha^2}{2!} + \frac{\alpha^4}{4!} - \cdots\right) \\ &\quad \pm i\sigma_k \left(\frac{\alpha}{1!} - \frac{\alpha^3}{3!} + \frac{\alpha^5}{5!} - \cdots\right) \\ &= \cos\alpha \pm i\sigma_k \sin\alpha . \end{aligned}$$

Như vậy

$$\begin{aligned} U(\beta, \hat{y}) \equiv \exp(-i\beta\hat{j}_y/\hbar) &= \exp\left(-i\frac{\beta}{2}\sigma_y\right) = \cos\frac{\beta}{2} - i\sigma_y \sin\frac{\beta}{2} \\ &= \cos\frac{\beta}{2} - i\frac{2}{\hbar}\hat{j}_y \sin\frac{\beta}{2} , \end{aligned}$$

và

$$\left\langle \frac{1}{2}, m \middle| U \middle| \frac{1}{2}, m' \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2}, m \middle| \exp(-i\beta\hat{j}_y/\hbar) \middle| \frac{1}{2}, m' \right\rangle$$
$$= \delta_{mm'} \cos\frac{\beta}{2} - \frac{i2}{\hbar} \left\langle \frac{1}{2}, m \middle| \hat{j}_y \middle| \frac{1}{2}, m' \right\rangle \sin\frac{\beta}{2} .$$

Do các phần tử ma trận của $\hat{j}_y$ trong số hạng thứ hai là độc lập với β,

$$\langle 1/2, m \,|\, U \,|\, 1/2, m' \rangle$$

là dạng thuần nhất tuyến tính của $\cos(\beta/2)$ và $\sin(\beta/2)$ và phát biểu này cũng là đúng.

Nếu phát biểu là đúng cho j, tức là

$$\langle j, m \,|\, U \,|\, j, m' \rangle = \langle j, m \,|\, \exp[-i\beta\hat{j}_y/\hbar] \,|\, j, m\rangle$$
$$= \sum_{n=0}^{2j} A_n \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-n} \left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^n ,$$

ở đây A_n phụ thuộc vào j, m, m', nghĩa là

$$A_n = A_n(j, m, m') ,$$

ta sẽ chứng minh rằng phát biểu cũng đúng cho $j + 1/2$. Đặt $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{j}}_1$, ở đây các số lượng tử của $\hat{\mathbf{j}}$ và $\hat{\mathbf{j}}_1$ là j và tương ứng là $1/2$. Ta có thể khai triển

$$|\, J, m\rangle = |\, j + 1/2, m\rangle$$

trong biểu diễn liên kết qua biểu diễn không liên kết

$$\left| j + \frac{1}{2}, m \right\rangle = C_1 \left| j, m + \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$
$$+ C_2 \left| j, m - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle ,$$

ở đây C_1 và C_2 (độc lập với β) là các hệ số Clebsch-Gordan. Áp dụng khai triển cho

$$\left\langle j + \frac{1}{2}, m \middle| \exp[-i\beta(\hat{j}_y + \hat{j}_{1y})/\hbar] \middle| j + \frac{1}{2}, m' \right\rangle ,$$

ta có thể rút gọn quy trình tính toán các phần tử ma trận

$$\left\langle \frac{1}{2}, \mp\frac{1}{2} \right| \left\langle j, m \pm \frac{1}{2} \right| \exp\left[-i\beta(\hat{j}_y + \hat{j}_{1y})/\hbar\right] \left| j, m' \pm \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \mp\frac{1}{2} \right\rangle,$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2} \right| \left\langle j, m \mp \frac{1}{2} \right| \exp\left[-i\beta(\hat{j}_y + \hat{j}_{1y})/\hbar\right] \left| j, m' \mp \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2} \right\rangle.$$

Ví dụ,

$$\begin{aligned}
&\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| \left\langle j, m + \frac{1}{2} \right| \exp\left[-i\beta(\hat{j}_y + \hat{j}_{1y})/\hbar\right] \left| j, m' + \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| \exp\left[-i\beta\hat{j}_{1y}/\hbar\right] \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
&\quad \times \left\langle j, m + \frac{1}{2} \right| \exp\left[-i\beta\hat{j}_y/\hbar\right] \left| j, m' + \frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \left(a_1 \cos\frac{\beta}{2} + b_1 \sin\frac{\beta}{2}\right) \sum_{n=0}^{2j} A_n \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-n} \left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^n \\
&= \sum_{l=0}^{2(j+\frac{1}{2})} B_n \left(j + \frac{1}{2}, m, m'\right) \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2(j+\frac{1}{2})-l} \left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^l .
\end{aligned}$$

Như vậy, phát biểu cũng đúng cho $j + 1/2$. Điều này nói lên, các phần tử ma trận

$$\langle j, m \,|\, U(\beta, \hat{y}) \,|\, j, m' \rangle = \langle j, m \,|\, \exp(-i\beta\hat{j}_y/\hbar) \,|\, j, m' \rangle ,$$

là các đa thức bậc $2j$ đối với các biến $\cos(\beta/2)$ và $\sin(\beta/2)$.

3011

Một toán tử f mô tả tương tác của hai hạt có spin có dạng

$$f = a + b\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 ,$$

ở đây a và b là hằng số, $\boldsymbol{\sigma}_1$ và $\boldsymbol{\sigma}_2$ là các ma trận Pauli. Mômen spin toàn phần là $\mathbf{J} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 = \frac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)$.

(a) Hãy chứng minh rằng f, $\mathbf{J}^2$ và J_z có thể đo được đồng thời.

(b) Hãy suy ra biểu diễn ma trận cho f trong cơ sở $|J, M, j_1, j_2\rangle$ (Đánh số các hàng và cột của ma trận đó).

(c) Hãy suy ra biểu diễn ma trận đối với f trong cơ sở $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) f, $\mathbf{J}^2$ và J_z có thể đo được đồng thời nếu chúng đôi một giao hoán nhau. Ta biết rằng $\mathbf{J}^2$ và J_z giao hoán nhau, đồng thời cả hai đại lượng này giao hoán với một hằng số a.

Từ định nghĩa,

$$\mathbf{J}^2 = \frac{\hbar^2}{4}\left(\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + 2\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2\right),$$

hay

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = \frac{2\mathbf{J}^2}{\hbar^2} - \frac{1}{2}\left(\sigma_1^2 + \sigma_2^2\right).$$

Bây giờ đối với mỗi hạt

$$\sigma^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = 3I,$$

I là ma trận đơn vị, do vậy

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = \frac{2\mathbf{J}^2}{\hbar^2} - 3.$$

Do đó

$$[\mathbf{J}^2, f] = [\mathbf{J}^2, a] + b[\mathbf{J}^2, \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2]$$
$$= b\left[\mathbf{J}^2, \frac{2\mathbf{J}^2}{\hbar^2} - 3\right] = 0,$$
$$[J_z, f] = [J_z, a] + b\left[J_z, \frac{2\mathbf{J}^2}{\hbar^2} - 3\right] = 0.$$

Do đó, f, $\mathbf{J}^2$ và J_z có thể đo được đồng thời.

(b) Trong cơ sở $|J, M, j_1, j_2\rangle$,

$$\langle J, M, j_1, j_2|f|J', M', j_1, j_2\rangle = a\delta_{JJ'}\delta_{MM'} + b\langle J, M, j_1, j_2|\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 |J', M', j_1, j_2\rangle$$

$$= a\delta_{JJ'}\delta_{MM'} + b\left[\frac{2}{\hbar^2}J'(J'+1)\hbar^2 - 3\right]$$

$$\times\, \delta_{JJ'}\delta_{MM'}$$

$$= [a + 2bJ(J+1) - 3b]\,\delta_{JJ'}\delta_{MM'}\,,$$

ở đây J, M là các chỉ số của hàng, J', M' là các chỉ số của cột.

(c) Kí hiệu trạng thái có $J = 0$ và trạng thái có $J = 1$ và $J_z = M$ tương ứng là χ_0 và χ_{1M}. Do $j_1 = j_2 = 1/2$, nên ta có thể kí hiệu trạng thái $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ đơn giản lại thành $|m_1, m_2\rangle$. Như vậy do

$$\begin{cases} \chi_0 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left|\dfrac{1}{2}, -\dfrac{1}{2}\right\rangle - \left|-\dfrac{1}{2}, \dfrac{1}{2}\right\rangle\right\}, \\ \chi_{10} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left|\dfrac{1}{2}, -\dfrac{1}{2}\right\rangle + \left|-\dfrac{1}{2}, \dfrac{1}{2}\right\rangle\right\}, \\ \chi_{1,\pm 1} = \left|\pm\dfrac{1}{2}, \pm\dfrac{1}{2}\right\rangle, \end{cases}$$

ta có

$$\begin{cases} \left|\pm\dfrac{1}{2}, \pm\dfrac{1}{2}\right\rangle = \chi_{1,\pm 1}, \\ \left|\dfrac{1}{2}, -\dfrac{1}{2}\right\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\chi_0 + \chi_{10}), \\ \left|-\dfrac{1}{2}, \dfrac{1}{2}\right\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(-\chi_0 + \chi_{10}). \end{cases}$$

Sử dụng biểu thức trên và kết quả của (b) ta có thể viết các phần tử ma trận $\langle m_1, m_2|f|m_1', m_2'\rangle$ trong cơ sở $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ như sau

m_1, m_2 \ m_1', m_2'	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$a+b$	0	0	0
+06 $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$a-b$	$2b$	0
$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	$2b$	$a-b$	0
$-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$a+b$

3012

Xét hàm sóng của hai hạt trong không gian vị trí như sau

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f(r_1^2)\, g(r_2^2)\, [\alpha(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_1)(\mathbf{b}\cdot\mathbf{r}_2) + \beta(\mathbf{b}\cdot\mathbf{r}_1)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_2) + \gamma(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})(\mathbf{r}_1\cdot\mathbf{r}_2)],$$

ở đây a và b là các hằng vectơ bất kì, f và g là các hàm bất kì, và α, β và γ là các hằng số.

(a) Các trị riêng của bình phương mômen xung lượng đối với từng hạt ($\mathbf{L}_1^2$ và $\mathbf{L}_2^2$)?

(b) Với sự lựa chọn thích hợp của α, β và γ, $\psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ cũng có thể là hàm riêng của bình phương mômen xung lượng toàn phần $\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)^2$. Xác định các giá trị có thể có của bình phương mômen xung lượng toàn phần và các giá trị thích hợp của α, β và γ đối với mỗi một trạng thái.

(*MIT*)

Lời giải:

(a) Trước tiên ta chú ý rằng

$$\nabla f(r) = f'(r)\,\frac{\mathbf{r}}{r},$$

hay

$$\mathbf{r}\times\nabla f(r) = f'(r)\,\frac{\mathbf{r}\times\mathbf{r}}{r} = 0,$$

và chú ý rằng

$$\mathbf{r}\times\nabla(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}) = \mathbf{r}\times\mathbf{a},$$

$$(\mathbf{r}\times\nabla)\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{a}) = -2\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}.$$

Do $\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p} = -i\hbar\,\mathbf{r}\times\nabla$, ta có

$$\begin{aligned}
L_1^2\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) &= -\hbar^2(\mathbf{r}_1\times\nabla_1)\cdot(\mathbf{r}_1\times\nabla_1)\,\{f(r_1^2)g(r_2^2)\,[\alpha(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_1)(\mathbf{b}\cdot\mathbf{r}_2)\\
&\quad + \beta(\mathbf{b}\cdot\mathbf{r}_1)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_2) + \gamma(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})(\mathbf{r}_1\cdot\mathbf{r}_2)]\}\\
&= -\hbar^2 f(r_1^2)g(r_2^2)(\mathbf{r}_1\times\nabla_1)\cdot(\mathbf{r}_1\times\nabla_1)\,[\alpha(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_1)(\mathbf{b}\cdot\mathbf{r}_2)\\
&\quad + \beta(\mathbf{b}\cdot\mathbf{r}_1)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_2) + \gamma(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})(\mathbf{r}_1\cdot\mathbf{r}_2)]\\
&= -\hbar^2 f(r_1^2)g(r_2^2)(\mathbf{r}_1\times\nabla_1)\cdot[\alpha(\mathbf{r}_1\times\mathbf{a})(\mathbf{b}\cdot\mathbf{r}_2)\\
&\quad + \beta(\mathbf{r}_1\times\mathbf{b})(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_2) + \gamma(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})(\mathbf{r}_1\times\mathbf{r}_2)]
\end{aligned}$$

$$= 2\hbar^2 f(r_1^2) g(r_2^2) [\alpha(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}_1)(\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}_2) + \beta(\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}_1)(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}_2)$$
$$+ \gamma(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)]$$
$$= 1(1+1)\hbar^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

và tương tự

$$L_2^2 \psi(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2) = -\hbar^2 (\mathbf{r}_2 \times \nabla_2) \cdot (\mathbf{r}_2 \times \nabla_2) \psi(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)$$
$$= 1(1+1)\hbar^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).$$

Như vậy, các trị riêng của L_1^2 và L_2^2 đều bằng $2\hbar^2$, và mỗi hạt có số lượng tử $l = 1$.

(b) Hơn nữa chú ý rằng

$$(\mathbf{r} \times \nabla) \cdot (\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{e} = (\mathbf{r} \times \mathbf{a}) \cdot \mathbf{c},$$
$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}).$$

Như vậy, ta cần

$$\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\hbar^2 (\mathbf{r}_1 \times \nabla_1) \cdot (\mathbf{r}_2 \times \nabla_2) \{ f(r_1^2) g(r_2^2) [\alpha(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}_1)$$
$$\times (\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}_2) + \beta(\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}_1)(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}_2) + \gamma(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)] \}$$
$$= -\hbar^2 f(r_1^2) g(r_2^2) (\mathbf{r}_1 \times \nabla_1) \cdot (\mathbf{r}_2 \times \nabla_2) [\alpha(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}_1)(\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}_2)$$
$$+ \beta(\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}_1)(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}_2) + \gamma(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)]$$
$$= -\hbar^2 f(r_1^2) g(r_2^2) (\mathbf{r}_1 \times \nabla_1) \cdot [\alpha(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}_1)(\mathbf{r}_2 \times \mathbf{b})$$
$$+ \beta(\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}_1)(\mathbf{r}_2 \times \mathbf{a}) + \gamma(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})(\mathbf{r}_2 \times \mathbf{r}_1)]$$
$$= -\hbar^2 f(r_1^2) g(r_2^2) [\alpha(\mathbf{r}_1 \times \mathbf{a}) \cdot (\mathbf{r}_2 \times \mathbf{b})$$
$$+ \beta(\mathbf{r}_1 \times \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{r}_2 \times \mathbf{a}) + \gamma(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})(2\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)]$$
$$= -\hbar^2 f(r_1^2) g(r_2^2) [-\beta(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}_1)(\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}_2) - \alpha(\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}_1)(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}_2)$$
$$+ (\alpha + \beta + 2\gamma)(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)]$$
$$= -\hbar^2 \lambda \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

để $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ là hàm riêng của $\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2$. Điều này đòi hỏi

$$-\beta = \lambda\alpha, \quad -\alpha = \lambda\beta, \quad \alpha + \beta + 2\gamma = \lambda\gamma,$$

suy ra các giá trị khả dĩ của λ

$$\lambda = -1, \quad \alpha = \beta = -\frac{3}{2}\gamma\,;$$
$$\lambda = +1, \quad \alpha = -\beta, \quad \gamma = 0\,;$$
$$\lambda = 2, \quad \alpha = \beta = 0\,.$$

Như vậy, các giá trị khả dĩ của mômen xung lượng toàn phần $\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + 2\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2$, và các giá trị tương ứng của α, β và γ là

$$\mathbf{J}^2 = 2\hbar^2 + 2\hbar^2 - 2\hbar^2\lambda = \begin{cases} 2(2+1)\hbar^2, & \left(\alpha = \beta = -\dfrac{3}{2}\gamma\right) \\ 1(1+1)\hbar^2, & (\alpha = -\beta, \quad \gamma = 0) \\ 0. & (\alpha = \beta = 0) \end{cases}$$

3013

Một trạng thái cơ học lượng tử của một hạt, trong hệ tọa độ Đềcác x, y và z, được mô tả bằng hàm sóng chuẩn hóa

$$\psi(x, y, z) = \frac{\alpha^{5/2}}{\sqrt{\pi}}\, z \exp\{-\alpha(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}\}\,.$$

Hãy chứng tỏ rằng hệ ở trong trạng thái có mômen xung lượng toàn phần xác định và hãy tính các giá trị của L^2 và L_z gắn với trạng thái đó.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Chuyển sang hệ tọa độ cầu

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta\,,$$

ta có

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{\alpha^{5/2}}{\sqrt{\pi}}\, r\cos\theta\, e^{-\alpha r} = f(r)\, Y_{10}\,.$$

Như vậy, hạt ở trạng thái có mômen xung lượng toàn phần xác định. Đối

với trạng thái này, $l = 1$, $L^2 = l(l+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$, $L_z = 0$.

3014

Một nguyên tử cacbon tự do có bốn electron kết cặp với nhau ở các trạng thái s và hai electron khác có hàm sóng quỹ đạo sóng p.

(a) Có bao nhiêu trạng thái được cho phép bởi nguyên lý loại trừ Pauli đối với cặp electron p trong cấu hình electron này?

(b) Giả thiết có sự tồn tại liên kết $L - S$, đâu là các số lượng tử tốt? Cho các tập giá trị của các số này đối với cấu hình của hai electron sóng p.

(c) Cộng các bậc suy biến của các số hạng tìm được ở câu (b) và chỉ ra rằng nó bằng với số các số hạng tìm được trong câu (a).

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Mỗi một electron có thể chiếm một trong $(2l+1)(2s+1) = 3 \times 2 = 6$ trạng thái, nhưng hai electron không được ở cùng một trạng thái. Vì vậy, số các trạng thái cho phép là $C_2^6 = 15$.

(b) Các số lượng tử "tốt" là L^2, S^2, J^2 và J_z. Với giả thiết có liên kết $L - S$, các số lượng tử spin tổng cộng của hai electron, $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$, là $S = 0, 1$ và các số lượng tử quỹ đạo toàn phần, $\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$, là $L = 0, 1, 2$. Do tính đối xứng trao đổi, với mức đơn $S = 0$, L phải là số chẵn: $L = 0, 2$, tương ứng với ${}^1S_0$, ${}^1D_2$ đối với mức bội ba $S = 1$, L lẻ: $L = 1$, tương ứng với ${}^3P_{0,1,2}$.

(c) Bậc suy biến bằng $2J + 1$. Với $J = 0, 2$ và 0, 1, 2 ở câu (b), tổng số các bậc suy biến là $1 + 5 + 1 + 3 + 5 = 15$.

3015

(a) Xác định các mức năng lượng của một hạt bị giam trong một thế đẳng hướng $V(r) = kr^2/2$, ở đây k là một hằng số dương.

(b) Hãy tìm công thức tính bậc suy biến của trạng thái kích thích thứ N.

(c) Hãy xác định mômen xung lượng góc và tính chẵn lẻ của trạng thái

kích thích thứ N. (*Columbia*)

Lời giải:

(a) Hamiltonian là

$$\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\,\nabla^2 + kr^2/2\,.$$

Chọn $(\hat{H}, \hat{l}^2, \hat{l}_z)$ có cùng các trạng thái riêng. Mức năng lượng của các trạng thái liên kết được tính bởi

$$E = (2n_r + l + 3/2)\,\hbar\omega_0 = (N + 3/2)\,\hbar\omega_0, \quad \omega_0 = \sqrt{k/m}\,.$$

(b) Bậc suy biến của các trạng thái được xác định bởi n_r và l. Do $N = 2n_r + l$, nên đặc trưng chẵn - lẻ của N giống như của l. Với N chẵn (tức là l chẵn), bậc suy biến là

$$\begin{aligned} f &= \sum_{l=0\ (l\text{ chẵn})}^{N} (2l+1) = 4 \sum_{l=0\ (l\text{ chẵn})}^{N} \left(\frac{l}{2} + \frac{1}{4}\right) = 4 \sum_{l'=0}^{N/2} \left(l' + \frac{1}{4}\right) \\ &= \frac{1}{2}\,(N+1)\,(N+2)\,. \end{aligned}$$

Với N lẻ (tức là l lẻ),

$$\begin{aligned} f &= \sum_{l=1\ (l\text{ lẻ})}^{N} (2l+1) = \sum_{l=1\ (l\text{ lẻ})}^{N} [2\,(l-1) + 3] = 4 \sum_{l'=0}^{(N-1)/2} \left(l' + \frac{3}{4}\right) \\ &= \frac{1}{2}\,(N+1)\,(N+2)\,. \end{aligned}$$

Như vậy, bậc suy biến của trạng thái kích thích thứ N là $f = (N+1)\,(N+2)/2$.

(c) Ở các trạng thái riêng thông thường của $(\hat{H}, l^2, l_z)$, hàm sóng của hệ là

$$\psi_{n_r l}(r, \theta, \varphi) = R(r)\,Y_{lm}(\theta, \varphi)\,,$$

và năng lượng riêng là

$$E_{n_r l} = (2n_r + l + 3/2)\,\hbar\omega_0\,.$$

Do $N = 2n_r + l$, mômen xung lượng l của trạng thái kích thích thứ N có $\frac{N}{2} + 1$ giá trị 0, 2, 4, 6, ..., N với N chẵn, hoặc $\frac{1}{2}(N+1)$ giá trị 1, 3, 5, ..., N với N lẻ. Hơn nữa, tính chẵn lẻ là

$$P = (-1)^l = (-1)^N\,.$$

3016

Trạng thái cơ bản của một nguyên tử hêli trong thực tế tất nhiên là không suy biến. Tuy nhiên, hãy xét một nguyên tử hêli giả định trong đó electron được thay bằng hai hạt giống hệt nhau, có spin bằng 1 và mang điện tích âm. Bỏ qua các lực phụ thuộc spin. Đối với nguyên tử giả định này, bậc suy biến ở trạng thái cơ bản là bao nhiêu? Giải thích.

(*CUS*)

Lời giải:

Hai hạt mới là boson; như vậy hàm sóng phải là đối xứng. Ở trạng thái cơ bản, hai hạt phải ở quỹ đạo thứ nhất. Vậy thì hàm sóng không gian là đối xứng và kết quả là hàm sóng spin cũng đối xứng. Vì $s_1 = 1$ và $s_2 = 1$, nên S tổng có ba giá trị có thể:

$S = 2$, hàm sóng spin đối xứng và bậc suy biến của nó là $2S + 1 = 5$.

$S = 1$, hàm sóng phản đối xứng và bậc suy biến của nó là $2S + 1 = 3$.

$S = 0$, hàm sóng spin đối xứng và bậc suy biến của nó là $2S + 1 = 1$.

Nếu các lực phụ thuộc spin bị bỏ qua thì bậc suy biến của trạng thái cơ bản là $5 + 3 + 1 = 9$.

3017

Thành phần z của spin một electron trong không gian tự do (không có mặt các điện từ trường) được đo và thấy bằng $+\hbar/2$.

(a) Nếu một phép đo tiếp theo được thực hiện cho thành phần x của spin thì các kết quả có thể là gì?

(b) Xác suất để tìm thấy các kết quả này là bao nhiêu?

(c) Nếu phương đo thành phần của spin tạo một góc θ với trục z ban đầu thì xác suất của các giá trị có thể là bao nhiêu?

(d) Giá trị kì vọng của phép đo spin ở câu (c) là bao nhiêu?

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Trong biểu diễn σ_z, hàm sóng spin là $\binom{1}{0}$, các hàm riêng của σ_x là $\frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{1}$, $\frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{-1}$, tương ứng với các trị riêng $+1$, -1. Khai triển $\binom{1}{0}$ theo hai

trạng thái này, ta thấy rằng các kết quả có thể xảy ra của một phép đo s_x là $\pm\hbar/2$. Do $\hat{s}_x = \frac{1}{2}\sigma_x$, giá trị trung bình bằng không

$$\langle s_x \rangle = (1,\ 0)\ \hat{s}_x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0\,.$$

(b) Các xác suất tìm thấy kết quả bằng $+\frac{\hbar}{2}$ và $-\frac{\hbar}{2}$ là P_+ và P_- tương ứng là

$$P_+ = \left| \frac{1}{\sqrt{2}}\,(1,\ 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2}\,,$$

$$P_- = \left| \frac{1}{\sqrt{2}}\,(1,\ -1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2}\,.$$

(c) Giả thiết trục spin là $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\theta,\ \varphi) = (\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$. Khi đó, các trạng thái riêng ứng với $s_n = \mathbf{s} \cdot \mathbf{n}$ là

$$\begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2}\, e^{-i\varphi/2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2}\, e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -\sin\dfrac{\theta}{2}\, e^{-i\varphi/2} \\ \cos\dfrac{\theta}{2}\, e^{i\varphi/2} \end{pmatrix},$$

lần lượt tương ứng với các trị riêng $+\hbar/2$ và $-\hbar/2$. Xác suất để tìm thấy các trị riêng $+\hbar/2$ và $-\hbar/2$ tương ứng là $\cos^2(\theta/2)$ và $\sin^2(\theta/2)$.

(d) Giá trị kì vọng của spin là

$$\frac{\hbar}{2}\,P_+ + \left(-\frac{\hbar}{2}\right)P_- = \frac{\hbar}{2}\cos^2\frac{\theta}{2} - \frac{\hbar}{2}\sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{\hbar}{2}\cos\theta\,.$$

3018

(a) Xét một hệ có spin 1/2. Các trị riêng và vectơ riêng chuẩn hóa của toán tử $A\,\hat{s}_y + B\,\hat{s}_z$ bằng bao nhiêu, ở đây $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ là các toán tử mômen xung lượng, và A và B là các hằng số.

(b) Giả thiết rằng hệ nằm ở trạng thái tương ứng với trị riêng cao. Xác suất để một phép đo đại lượng $\hat{s}_y$ đạt giá trị $\hbar/2$ là bao nhiêu? Các ma trận Pauli là

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \qquad (CUS)$$

Lời giải:

(a) Sử dụng các toán tử mômen xung lượng ta đặt

$$\hat{T} = A\hat{s}_y + B\hat{s}_z = A\,\frac{1}{2}\,\hbar\sigma_y + B\,\frac{1}{2}\,\hbar\sigma_z .$$

Như vậy

$$(\hat{T})^2 = \frac{1}{4}\,\hbar^2(A^2 + B^2 + AB\{\sigma_y, \sigma_z\}) = \frac{1}{4}\,\hbar^2(A^2 + B^2),$$

Do

$$\sigma_i^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I, \quad i = 1, 2, 3,$$

và

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} \equiv \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij} .$$

Vì thế hai trị riêng của $\hat{T}$ là

$$T_1 = \frac{1}{2}\,\hbar\,\sqrt{A^2 + B^2}, \quad T_2 = -\frac{1}{2}\,\hbar\,\sqrt{A^2 + B^2} .$$

Trong biểu diễn $\hat{\mathbf{s}}^2$ và $\hat{s}_z$,

$$\hat{T} = \frac{\hbar}{2}\,(A\sigma_y + B\sigma_z) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} B & -iA \\ iA & -B \end{pmatrix} .$$

Đặt vectơ riêng là $\binom{a}{b}$. Khi đó, phương trình riêng là

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} B & -iA \\ iA & -B \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = T\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

ở đây

$$T = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \pm\sqrt{A^2 + B^2} & 0 \\ 0 & \mp\sqrt{A^2 + B^2} \end{pmatrix},$$

hay

$$\begin{pmatrix} B \mp \sqrt{A^2 + B^2} & -iA \\ iA & -B \mp \sqrt{A^2 + B^2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 .$$

Như vậy

$$a : b = iA : B \mp \sqrt{A^2 + B^2},$$

và do đó vectơ riêng chuẩn hóa là

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \left[\frac{1}{A^2 + (B \mp \sqrt{A^2 + B^2})^2}\right]^{1/2} \begin{pmatrix} +iA \\ B \mp \sqrt{A^2 + B^2} \end{pmatrix}.$$

(b) Trong biểu diễn $\hat{s}^2$ và $\hat{s}_z$, vectơ riêng của $\hat{s}_y$ là

$$\left| s_y = \frac{\hbar}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Như vậy, xác suất để tìm thấy $s_y = \hbar/2$ là

$$P_{\mp} = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (i\ 1) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (ia + b)^2 \right|^2 = \frac{(B \mp \sqrt{A^2 + B^2} - A)^2}{2[(B \mp \sqrt{A^2 + B^2})^2 + A^2]}.$$

Chú ý rằng P_- là xác suất tương ứng với hệ ở trạng thái có trị riêng $T = \hbar\sqrt{A^2 + B^2}/2$, và P_+ là xác suất ứng với trạng thái có trị riêng $T = -\hbar\sqrt{A^2 + B^2}/2$.

3019

Một hệ gồm ba hạt có spin một nửa (không giống nhau) có các toán tử spin $\mathbf{s}_1$, $\mathbf{s}_2$ và $\mathbf{s}_3$, được quyết định bởi Hamiltonian

$$H = A\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2/\hbar^2 + B(\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2) \cdot \mathbf{s}_3/\hbar^2.$$

Hãy tìm năng lượng và các bậc suy biến của chúng.

(*Princeton*)

Lời giải:

Sử dụng một tập đầy đủ các biến động lực của hệ $(H, \mathbf{s}_{12}^2, \mathbf{s}^2, s_3)$, ở đây $\mathbf{s}_{12} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$, $\mathbf{s} = \mathbf{s}_{12} + \mathbf{s}_3 = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3$, hàm riêng là $|s_{12}\, s_3\, s\, m_s\rangle$, và phương trình trạng thái dừng là

$$\hat{H}\,|s_{12}s_3sm_s\rangle = E\,|s_{12}s_3sm_s\rangle.$$

Do

$$\mathbf{s}_1^2 = \mathbf{s}_2^2 = \mathbf{s}_3^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{s}_{12}^2 - \mathbf{s}_1^2 - \mathbf{s}_2^2),$$

$$(\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2) \cdot \mathbf{s}_3 = \frac{1}{2}(\mathbf{s}^2 - \mathbf{s}_{12}^2 - \mathbf{s}_3^2),$$

ta có

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{A}{\hbar^2}\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 + \frac{B}{\hbar^2}(\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2) \cdot \mathbf{s}_3 \\ &= \frac{A}{2}\left[\frac{1}{\hbar^2}\mathbf{s}_{12}^2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\right] \\ &\quad + \frac{B}{2}\left[\frac{1}{\hbar^2}\mathbf{s}^2 - \frac{1}{\hbar^2}\mathbf{s}_{12}^2 - \frac{3}{4}\right].\end{aligned}$$

Do giá trị kì vọng của $\mathbf{s}^2$ là $s(s+1)$, v.v., ta có

$$\begin{aligned}\hat{H}\,|s_{12}\,s_3\,sm_s\rangle = \Bigg\{ &\frac{A}{2}\left[s_{12}(s_{12}+1) - \frac{3}{2}\right] \\ &+ \frac{B}{2}\left[s(s+1) - s_{12}(s_{12}+1) - \frac{3}{4}\right]\Bigg\}\,|s_{12}\,s_3\,sm_s\rangle,\end{aligned}$$

và như vậy

$$\begin{aligned}E = &\frac{A}{2}\left[s_{12}(s_{12}+1) - \frac{3}{2}\right] \\ &+ \frac{B}{2}\left[s(s+1) - s_{12}(s_{12}+1) - \frac{3}{4}\right].\end{aligned}$$

Suy ra với $s_{12} = 0$, $s = 1/2$: $E = -3A/4$, bậc suy biến của mức năng lượng, $2s+1$, là 2; với $s_{12} = 1$, $s = 1/2$: $E = A/4 - B$, bậc suy biến của mức năng lượng, là 2; với $s_{12} = 1$, $s = 3/2$: $E = A/4 + B/2$, bậc suy biến của mức năng lượng là 4.

3020

Một hạt có spin bằng 1 và Hamiltonian $H = As_z + Bs_x^2$, ở đây A và B là hằng số. Hãy tính các mức năng lượng của hệ này. Nếu tại thời điểm $t = 0$

spin này ở một trạng thái riêng của s với $s_z = +\hbar$, hãy tính giá trị kì vọng của spin tại thời điểm t.

(*Princeton*)

Lời giải:

Trước hết ta tìm các mức năng lượng ở trạng thái dừng của hệ. Phương trình Schrödinger trạng thái dừng là

$$E\psi = \hat{H}\psi = (As_z + Bs_x^2)\psi,$$

ở đây

$$\psi = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}$$

là một vectơ trong không gian spin. Do

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \hbar,$$

$$s_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hbar,$$

$$s_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \hbar^2,$$

ta có

$$\hat{H} = As_z + Bs_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & -iA' & 0 \\ iA' & B' & 0 \\ 0 & 0 & B' \end{pmatrix},$$

ở đây $A' = A\hbar$, $B' = B\hbar^2$. Các mức năng lượng được cho bởi các trị riêng của ma trận trên và là nghiệm của phương trình

$$\text{Det} \begin{pmatrix} -E & -iA' & 0 \\ iA' & B' - E & 0 \\ 0 & 0 & B' - E \end{pmatrix} = 0,$$

nghĩa là,

$$(E - B')(E^2 - B'E - A') = 0.$$

Như vậy, các mức năng lượng là

$$E_0 = B', \quad E_\pm = (B'' \pm \omega)\hbar/2,$$

ở đây $\omega = \sqrt{B'^2 + 4A'^2}/\hbar$, $B'' = B'/\hbar = B\hbar$. Các hàm riêng tương ứng là

$$E_0 = B' : \quad \varphi_{s_0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$E_+ = \frac{B'}{2} + \frac{\sqrt{B'^2 + 4A'^2}}{2} : \quad \varphi_{s+} = \sqrt{\frac{\omega - B''}{2\omega}} \begin{pmatrix} 1 \\ i\sqrt{\dfrac{\omega + B''}{\omega - B''}} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$E_- = \frac{B'}{2} - \frac{\sqrt{B'^2 + 4A'^2}}{2} : \quad \varphi_{S-} = \sqrt{\frac{\omega + B''}{2\omega}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i\sqrt{\dfrac{\omega - B''}{\omega + B''}} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Hàm sóng tổng quát của hệ do vậy là

$$\varphi_S(t) = C_1 \varphi_{S0} \exp\left[-\frac{iB'}{\hbar} t\right] + C_2 \varphi_{S+} \exp\left[-i\frac{E_+}{\hbar} t\right] + C_3 \varphi_{S-} \exp\left[-i\frac{E_-}{\hbar} t\right].$$

Ban đầu,

$$s_z \varphi_s(0) = \hbar \varphi_s(0).$$

Đặt

$$\varphi_s(0) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}.$$

phương trình trên dẫn đến

$$\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix},$$

tức là,

$$\beta = i\alpha, \quad \gamma = 0.$$

Như vậy, ta có thể lấy hàm sóng ban đầu (chuẩn hóa) như sau

$$\varphi_S(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Cho $\varphi_s(0)$ bằng với $C_1\varphi_{S0} + C_2\varphi_{S+} + C_3\varphi_{S-}$ dẫn đến

$$C_1 = 0, \; C_2 = \frac{(\omega + B'')^{1/2} + (\omega - B'')^{1/2}}{2\omega^{1/2}},$$

$$C_3 = \frac{(\omega + B'')^{1/2} - (\omega - B'')^{1/2}}{2\omega^{1/2}}.$$

Bây giờ ta có thể tìm giá trị kì vọng của spin

$$\langle s_x \rangle = \varphi_S^+(t)\, s_x \varphi_S(t) = 0,$$

ở đây ta đã sử dụng tính trực giao của φ_{S0}, φ_{S+} và φ_{S-}. Tương tự,

$$\langle s_y \rangle = 0,$$

$$\langle s_z \rangle = \varphi_S^+(t) s_z \varphi_S(t) = \left[1 - \frac{2B^2\hbar^2}{\omega^2}\sin^2(\omega t/2)\right]\hbar.$$

3021

Một hệ gồm hai hạt có spin 1/2 được mô tả bởi Hamiltonian hiệu dụng

$$H = A(s_{1z} + s_{2z}) + B\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2,$$

ở đây $\mathbf{s}_1$ và $\mathbf{s}_2$ là hai spin, s_{1z} và s_{2z} là các thành phần spin theo phương z, và A và B là các hằng số. Hãy tìm tất cả các mức năng lượng của Hamiltonian này.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Ta chọn χ_{SM_S} là trạng thái riêng chung của $\mathbf{S}^2 = (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2)^2$ và $S_z = s_{1z} + s_{2z}$. Với $S = 1$, $M_S = 0, \pm 1$, là một mức bội ba và đối xứng khi hai

electron tráo đổi cho nhau. Với $S = 0$, $M_S = 0$, là một mức đơn và bất đối xứng. Đối với các trạng thái dừng ta sử dụng phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian

$$H\chi_{SM_S} = E\chi_{SM_S} .$$

Do

$$\mathbf{S}^2\chi_{1M_S} = S(S+1)\hbar^2\chi_{1M_S} = 2\hbar^2\chi_{1M_S}, \ \mathbf{S}^2\chi_{00} = 0 ,$$

$$\mathbf{S}^2 = (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2)^2 = \mathbf{s}_1^2 + \mathbf{s}_2^2 + 2\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$$

$$= \frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3}{4}\hbar^2 + 2\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 ,$$

ta có

$$\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \chi_{1M_S} = \left(\frac{S^2}{2} - \frac{3}{4}\hbar^2\right)\chi_{1M_S} = \left(\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2\right)\chi_{1M_S} = \frac{\hbar^2}{4}\chi_{1M_S} ,$$

$$\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \chi_{00} = \left(0 - \frac{3}{4}\hbar^2\right)\chi_{00} = -\frac{3}{4}\hbar^2\chi_{00} ,$$

và

$$S_z\chi_{1M_S} = (s_{1z} + s_{2z})\chi_{1M_S} = M_S\hbar\chi_{1M_S} ,$$

$$s_z\chi_{00} = 0 .$$

Như vậy, đối với trạng thái bội ba, các mức năng lượng là

$$E = M_S\hbar A + \frac{\hbar^2}{4}B, \quad \text{với} \quad M_S = 0, \pm 1 ,$$

gồm ba vạch

$$E_1 = \hbar A + \frac{\hbar^2}{4}B, \ E_2 = \frac{\hbar^2}{4}B, \ E_3 = -\hbar A + \frac{\hbar^2}{4}B .$$

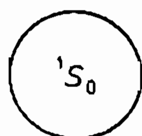
Đối với trạng thái đơn, mức năng lượng chỉ gồm một vạch

$$E_0 = -\frac{3}{4}\hbar^2 B .$$

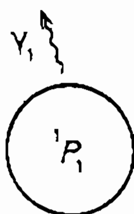
3022

Giả thiết một nguyên tử ban đầu nằm ở trạng thái kích thích $^1S_0$ (Hình 3.1) và sau đó trở về trạng thái $^1P_1$ thấp hơn có thời gian sống ngắn kèm theo sự

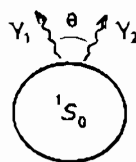
phát ra một photon γ_1 (Hình 3.2). Ngay sau đó, nó trở về trạng thái cơ bản $^1S_0$ bằng cách phát ra một photon thứ hai γ_2 (Hình 3.3). Đặt θ là góc giữa hai photon phát ra.



Hình 3.1



Hình 3.2



Hình 3.3

(a) Tính xác suất tương đối của θ trong quá trình này.

(b) Tỉ số giữa các xác suất tìm thấy hai photon có tính phân cực tròn cùng chiều và phân cực tròn ngược chiều là bao nhiêu?

Có thể hữu ích nếu ta biết các ma trận quay $d_{m'm}$, liên hệ một biểu diễn mômen xung lượng trong một hệ tọa độ với một biểu diễn khác của mômen xung lượng ở trong một hệ tọa độ quay, được viết như dưới đây

$$d_{m'm} = \begin{array}{c} \\ m'=1 \\ m'=0 \\ m'=-1 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} m=1 & m=0 & m=-1 \end{array} \\ \begin{pmatrix} \frac{1+\cos\alpha}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\alpha & \frac{1-\cos\alpha}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\alpha & \cos\alpha & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\alpha \\ \frac{1-\cos\alpha}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\alpha & \frac{1+\cos\alpha}{2} \end{pmatrix} \end{array}$$

ở đây α là góc giữa trục z của một hệ và trục z' của hệ trục kia.

(*Columbia*)

Lời giải:

Nguyên tử ban đầu nằm ở trạng thái kích thích $^1S_0$. Như vậy, hình chiếu của mômen xung lượng nguyên tử lên một phương z bất kì là $L_z = 0$. Ta có thể chọn phương phát photon thứ nhất là theo phương z. Sau khi phát ra photon thứ nhất và nguyên tử đi tới trạng thái $^1P_1$ nếu mômen xung lượng của photon đó là $L_z = \pm\hbar$, tương ứng với nó mômen xung lượng của trạng thái nguyên tử $^1P_1$ là $L_z = \mp\hbar$, tức là, $m_z = \mp 1$. Nếu ta cho phương phát photon thứ hai là trục z' thì hình chiếu của trạng thái riêng của thành phần z của mômen xung lượng theo phương z' bằng tích của trạng thái ban đầu với ma trận $d_{m'm}$. Chỉ

có các nguyên tử ở các trạng thái $m'_z = \pm 1$ có thể phát photon (do điều kiện $L'_z = \pm\hbar$ phải được thỏa mãn) theo phương z' và làm cho chúng trở về trạng thái ${}^1S_0$ ($m'_z = 0$). Do đó, các chuyển dời là từ $m = \pm 1$ tới $m' = \pm 1$, và ta có

$$C_1 = \langle m_{z'} = -1 \,|\, d_{m'm} \,|\, m_z = +1 \rangle$$

$$= (0,\ 0,\ 1) \begin{pmatrix} \frac{1+\cos\theta}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1-\cos\theta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \cos\theta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \\ \frac{1-\cos\theta}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1+\cos\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1-\cos\theta}{2},$$

$$C_2 = \langle m_{z'} = +1 \,|\, d_{m'm} \,|\, m_z = +1 \rangle$$

$$= (1,\ 0,\ 0) \begin{pmatrix} \frac{1+\cos\theta}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1-\cos\theta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \cos\theta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \\ \frac{1-\cos\theta}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1+\cos\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1+\cos\theta}{2},$$

$$C_3 = \langle m_{z'} = +1 \,|\, d_{m'm} \,|\, m_z = -1 \rangle = \frac{1-\cos\theta}{2},$$

$$C_4 = \langle m_{z'} = -1 \,|\, d_{m'm} \,|\, m_z = -1 \rangle = \frac{1+\cos\theta}{2}.$$

(a) Xác suất tương đối của θ là

$$P(\theta) \propto |C_1|^2 + |C_2|^2 + |C_3|^2 + |C_4|^2 = 1 + \cos^2\theta.$$

(b) Tỉ số của các xác suất tìm thấy hai photon với phân cực tròn cùng chiều và ngược chiều là

$$(|C_2|^2 + |C_4|^2)\,/\,(|C_1|^2 + |C_3|^2) = (1+\cos\theta)^2\,/\,(1-\cos\theta)^2.$$

3023

Xét một electron trong một từ trường đều theo hướng z dương. Kết quả của một phép đo chỉ ra rằng spin của electron hướng theo phương x tại thời điểm t = 0. Sử dụng định lý Ehrenfest để tính xác suất với $t > 0$ thì electron ở trạng thái (a) $s_x = 1/2$, (b) $s_x = -1/2$, (c) $s_y = 1/2$, (d) $s_y = -1/2$, (e) $s_z = 1/2$, (f) $s_z = -1/2$.

Định lý Ehrenfest phát biểu rằng giá trị kì vọng của một toán tử cơ học lượng tử tuân theo phương trình chuyển động cổ điển.

[Gợi ý: Nhớ lại mối liên hệ giữa các giá trị kì vọng và các giá trị xác suất tương ứng].

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Trong bức tranh cổ điển, một electron quay với mômen xung lượng s trong một từ trường **B** sẽ, nếu như các phương s và **B** không trùng nhau, số chuyển động tiến động quanh phương của **B** với một vận tốc góc w được tính bởi

$$\frac{d\mathbf{s}}{dt} = \mathbf{s} \times \boldsymbol{\omega} ,$$

ở đây $\omega = \frac{e}{mc}\mathbf{B}$, m là khối lượng của mômen xung lượng. Định lý Ehrenfest như vậy phát biểu rằng trong cơ học lượng tử ta có

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{s} \rangle = \frac{e}{mc}\langle \mathbf{s} \rangle \times \mathbf{B} .$$

Điều này có thể suy được một cách trực tiếp như sau:

Một electron có mômen xung lượng s có một mômen từ $\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{mc}\mathbf{s}$ và Hamiltonian có dạng

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\frac{e}{mc} B s_z ,$$

với trục z trùng với phương của **B**. Như vậy

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \mathbf{s} \rangle}{dt} &= \overline{\frac{1}{i\hbar}[\mathbf{s}, \hat{H}]} = -\frac{eB}{i\hbar mc}\overline{[s_x\hat{\mathbf{x}} + s_y\hat{\mathbf{y}} + s_z\hat{\mathbf{z}}, s_z]} \\
&= -\frac{eB}{i\hbar mc}\left\{\overline{[s_x, s_z]}\,\hat{\mathbf{x}} + \overline{[s_y, s_z]}\,\hat{\mathbf{y}}\right\} \\
&= -\frac{e}{mc} B(-\langle s_y \rangle \hat{\mathbf{x}} + \langle s_x \rangle \hat{\mathbf{y}}) \\
&= \frac{e}{mc}\langle \mathbf{s} \rangle \times \mathbf{B} ,
\end{aligned}$$

phù hợp với biểu thức của định lý Ehrenfest trong cơ học lượng tử. Chú ý rằng, ở đây ta đã sử dụng các hệ thức giao hoán $[s_x, s_y] = i\hbar s_z$, v.v.

Ban đầu $\langle s_x \rangle = 1/2$, $\langle s_y \rangle = \langle s_z \rangle = 0$, và như vậy ta có thể viết với $t > 0$, $\langle s_x \rangle = (\cos\omega t)/2$, $\langle s_y \rangle = (\sin\omega t)/2$, $\langle s_z \rangle = 0$.

Đặt xác suất với $t > 0$ của electron ở trạng thái $s_x = 1/2$ là P và ở trạng thái $s_x = -1/2$ là $1 - P$ do chúng là hai trạng thái duy nhất của s_x. Như vậy

$$P\left(\frac{1}{2}\right) + (1-P)\left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\cos\omega t\,,$$

dẫn đến

$$P = \cos^2(\omega t/2), \quad 1 - P = \sin^2(\omega t/2)\,.$$

Tương tự, đặt các xác suất để electron ở các trạng thái $s_y = 1/2$, $s_y = -1/2$ tương ứng là P và $1 - P$. Như vậy

$$P\left(\frac{1}{2}\right) + (1-P)\left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\sin\omega t = \frac{1}{2}\cos\left(\frac{\pi}{2} - \omega t\right)\,,$$

hay

$$P = \frac{1}{2}\left[1 + \cos\left(\frac{\pi}{2} - \omega t\right)\right] = \cos^2\left(\frac{\omega t}{2} - \frac{\pi}{4}\right)\,,$$

và như vậy $1 - P = \sin^2\left(\frac{\omega t}{2} - \frac{\pi}{4}\right)$. Cuối cùng với (e) và (f), ta có

$$P - \frac{1}{2} = 0, \quad \text{dẫn đến} \quad P = \frac{1}{2}, \quad 1 - P = \frac{1}{2}\,.$$

3024

Một hạt với mômen từ $\mu = \mu_0 \mathbf{s}$ và spin s, với độ lớn $1/2$, được đặt trong một từ trường không đổi nằm theo phương x. Tại thời điểm $t = 0$, hạt có $s_z = +1/2$. Hãy tìm xác suất để tại một thời điểm bất kì sau đó hạt có $s_y = \pm 1/2$.

(*Columbia*)

Lời giải:

Hamiltonian (phần cho spin) của hệ là

$$\hat{H} = -\mu_0 \hat{s} \cdot \mathbf{B} = -\frac{1}{2}\hat{\sigma}_x B \mu_0\,,$$

Do $s = \frac{1}{2}\hbar\sigma_x$, và hướng theo phương x. Trong biểu diễn của σ_x, phương trình Schrödinger để tìm hàm sóng spin $\binom{a_1}{a_2}$ là

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\mu_0 B\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}=0,$$

hay

$$\begin{cases}i\hbar\dfrac{d}{dt}a_1+\dfrac{1}{2}\mu_0 Ba_2=0,\\ i\hbar\dfrac{d}{dt}a_2+\dfrac{1}{2}\mu_0 Ba_1=0.\end{cases}$$

Loại a_1 hoặc a_2 ta được

$$\frac{d^2}{dt^2}a_{1,2}+\frac{\mu_0^2B^2}{4\hbar^2}a_{1,2}=0,$$

phương trình trên có các nghiệm

$$a_{1,2}=A_{1,2}e^{i\omega t}+B_{1,2}e^{-i\omega t},$$

ở đây

$$\omega=\frac{\mu_0 B}{2\hbar}$$

và $A_{1,2}$, $B_{1,2}$ là các hằng số. Do

$$\hat{s}_z=\frac{1}{2}\sigma_z=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

và

$$\hat{s}_z\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},$$

nên hàm sóng spin ban đầu là $\binom{1}{0}$, tức là $a_1(0)=1$, $a_2(0)=0$. Phương trình Schrödinger như vậy dẫn đến

$$\left.\frac{da_1}{dt}\right|_{t=0}=0,\quad \left.\frac{da_2}{dt}\right|_{t=0}=i\frac{\mu_0 B}{2\hbar}=i\omega.$$

Bốn điều kiện ban đầu này dẫn tới

$$\begin{cases}A_1+B_1=1, & A_2+B_2=0,\\ \omega(A_1-B_1)=0, & \omega(A_2-B_2)=\omega,\end{cases}$$

với nghiệm $A_1 = A_2 = B_1 = -B_2 = 1/2$. Thế vào các biểu thức của $a_{1,2}$, ta được

$$\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\omega t \\ i\sin\omega t \end{pmatrix} .$$

Do trạng thái riêng của $s_y = +1/2$ là

$$|\, s_y(+)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

và trạng thái riêng của $s_y = -1/2$ là

$$|\, s_y(-)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} ,$$

xác suất tìm thấy $s_y = +1/2$ là

$$\begin{aligned} P(+) &= |\,\langle s_y(+)\,|\,\psi(t)\rangle\,|^2 \\ &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ -i) \begin{pmatrix} \cos\omega t \\ i\sin\omega t \end{pmatrix} \right|^2 \\ &= \frac{1}{2}(1+\sin 2\omega t) . \end{aligned}$$

tương tự xác suất tìm thấy $s_y = -1/2$ là

$$P(-) = |\,\langle s_y(-)\,|\,\psi(t)\rangle\,|^2 = \frac{1}{2}(1-\sin 2\omega t) .$$

3025

Hamiltonian của một hạt spin $\frac{1}{2}$ có điện tích $+e$ dưới tác dụng của một từ trường ngoài là

$$H = -\frac{ge}{2mc}\mathbf{s}\cdot\mathbf{B} .$$

Hãy tính toán tử $d\mathbf{s}/dt$ nếu $\mathbf{B} = B\hat{y}$. Dạng ma trận của $s_z(t)$ sẽ như thế nào?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Trong biểu diễn Heisenberg,

$$\frac{d\mathbf{s}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{s}, H] = -\frac{ge}{i2m\hbar c}[\mathbf{s}, \mathbf{s}\cdot\mathbf{B}] .$$

Do

$$[\mathbf{s}, \mathbf{s}\cdot\mathbf{B}] = [s_x, \mathbf{s}\cdot\mathbf{B}]\hat{\mathbf{x}} + [s_y, \mathbf{s}\cdot\mathbf{B}]\hat{\mathbf{y}} + [s_z, \mathbf{s}\cdot\mathbf{B}]\hat{\mathbf{z}}$$

và

$$\begin{aligned}[s_x, \mathbf{s}\cdot\mathbf{B}] &= [s_x, s_x]\,B_x + [s_x, s_y]\,B_y + [s_x, s_z]\,B_z \\ &= i\hbar\,(s_z B_y - s_y B_z) \\ &= i\hbar\,(\mathbf{B}\times\mathbf{s})_x, \quad \text{v.v}\end{aligned}$$

ta có

$$[\mathbf{s}, \mathbf{s}\cdot\mathbf{B}] = -i\hbar\,\mathbf{s}\times\mathbf{B},$$

và như vậy

$$\frac{d\mathbf{s}}{dt} = +\frac{ge}{2mc}\,\mathbf{s}\times\mathbf{B}.$$

Nếu $\mathbf{B} = B\,\hat{\mathbf{y}}$, phương trình trên dẫn đến

$$\frac{ds_x(t)}{dt} = -\frac{geB}{2mc}\,s_z(t),$$
$$\frac{ds_z(t)}{dt} = \frac{geB}{2mc}\,s_x(t),$$

và như vậy

$$\frac{d^2 s_z(t)}{dt^2} + \left(\frac{geB}{2mc}\right)^2 s_z(t) = 0,$$

với nghiệm

$$s_z(t) = c_1\cos(g\omega t) + c_2\sin(g\omega t),$$

ở đây $\omega = eB/2mc$. Tại $t = 0$ ta có

$$s_z(0) = c_1, \quad s'_z(0) = c_2 g\omega = g\omega s_x(0),$$

và như vậy

$$s_z(t) = s_z(0)\cos\left(\frac{geB}{2mc}t\right) + s_x(0)\sin\left(\frac{geB}{2mc}t\right).$$

3026

Hai electron bị liên kết chặt với các vị trí lân cận khác nhau trong một chất rắn. Do đó, chúng là các hạt có thể phân biệt được và được mô tả dưới dạng

các ma trận spin Pauli tương ứng của chúng $\sigma^{(1)}$ và $\sigma^{(2)}$. Hamiltonian của các electron này có dạng

$$H = -J(\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)} + \sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}),$$

ở đây J là hằng số.

(a) Hệ này có thể có bao nhiêu mức năng lượng? Các giá trị năng lượng này bằng bao nhiêu? Bậc suy biến của các mức đó là bao nhiêu?

(b) Bây giờ thêm từ trường tác dụng theo phương z. Các mức năng lượng mới sẽ như thế nào? Hãy vẽ giản đồ năng lượng theo hàm của B_z.

(*Chicago*)

Lời giải:

(a) Hamiltonian của hệ là

$$\begin{aligned}
H &= -J[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)} + \sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}] \\
&= -J\left[\frac{(\boldsymbol{\sigma}^{(1)} + \boldsymbol{\sigma}^{(2)})^2 - \boldsymbol{\sigma}^{(1)^2} - \boldsymbol{\sigma}^{(2)^2}}{2}\right. \\
&\quad \left. - \frac{(\sigma_z^{(1)} + \sigma_z^{(2)})^2 - \sigma_z^{(1)^2} - \sigma_z^{(2)^2}}{2}\right] \\
&= -J\left[\frac{(\boldsymbol{\sigma}^{(1)} + \boldsymbol{\sigma}^{(2)})^2 - 3 - 3}{2}\right. \\
&\quad \left. - \frac{(\sigma_z^{(1)} + \sigma_z^{(2)})^2 - 1 - 1}{2}\right] \\
&= -J\left[\frac{(\boldsymbol{\sigma}^{(1)} + \boldsymbol{\sigma}^{(2)})^2 - (\sigma_z^{(1)} + \sigma_z^{(2)})^2}{2} - 2\right] \\
&= -\frac{2J}{\hbar^2}(\mathbf{s}^2 - s_z^2 - \hbar^2),
\end{aligned}$$

ở đây

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}^{(1)} + \mathbf{s}^{(2)} = \frac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}^{(1)} + \boldsymbol{\sigma}^{(2)})$$

là spin toàn phần của hệ và

$$s_z = s_z^{(1)} + s_z^{(2)} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_z^{(1)} + \sigma_z^{(2)})$$

là thành phần theo phương z của nó, s^2, s_z và H có tính giao hoán. Sử dụng phương trình trên và lý thuyết liên kết tương tác của mômen xung lượng, ta có (chú ý trị riêng của s^2 là $s(s+1)\hbar^2$)

s	s_z	số các trạng thái	năng lượng
1	1	1	0
	0	2	$-2J$
	-1	1	0
0	0	2	$2J$

Như đã thấy ở bảng trên, hệ có ba mức năng lượng $-2J$, 0, $2J$, mỗi mức có bậc suy biến là 2. Chú ý rằng nếu các electron là không thể phân biệt thì các hàng thứ hai và bốn của bảng sẽ phải biểu diễn khác.

(b) Với sự có mặt của từ trường $|\mathbf{B}| = B_z$,

$$H = -J[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)} + \sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}] - \boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B},$$

ở đây

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{mc}\mathbf{s},$$

$-e$ và m tương ứng là điện tích và khối lượng của electron. Như vậy

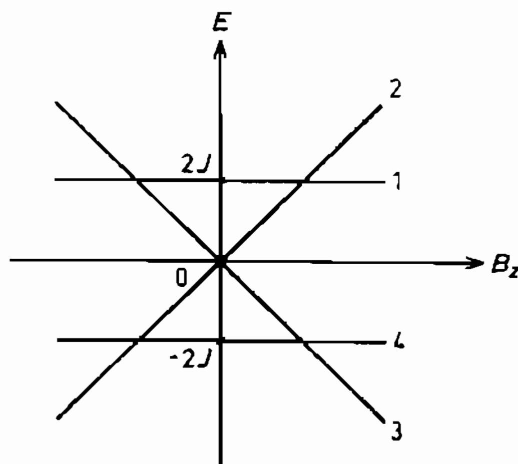
$$H = -J[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)} + \sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}] + \frac{e}{mc}s_z B_z$$
$$= -2J\left[s(s+1) - \frac{s_z^2}{\hbar^2} - 1\right] + \frac{eB_z}{mc}s_z.$$

s^2, s_z và H vẫn là các đại lượng giao hoán, do vậy các mức năng lượng mới là: $2J$, $eB_z\hbar/mc$, $-eB_z\hbar/mc$, $-2J$. Giản đồ năng lượng được chỉ ra trên Hình 3.4 theo hàm của B_z (các đường 1, 2, 3 và 4 tương ứng với các mức năng lượng trên).

3027

Một nguyên tử cacbon tự do có bốn electron kết cặp ở các trạng thái s và hai electron ở trạng thái p. Giả thiết tồn tại liên kết cấu trúc tinh tế $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$, tức là L^2, S^2 và J^2 là các số lượng tử "tốt".

(a) Hãy lập bảng các giá trị S, L và J của các trạng thái có thể, chỉ ra các bậc suy biến tương ứng.



Hình 3.4

(b) Trạng thái nào có năng lượng thấp nhất? Giải thích.

(*Columbia*)

Lời giải:

(a) Một nguyên tử cacbon có hai electron $1s$ và hai electron $2s$ tạo nên hai lớp vỏ đầy. Như vậy, các trạng thái nguyên tử được xác định bởi sự tổ hợp hai electron $2p$. Trong liên kết **L − S**, do $l_1 = l_2 = 1$, $s_1 = s_2 = 1/2$, ta có $L = |\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2| = 0, 1, 2$; $S = |\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2| = 0, 1$. Kể đến nguyên lý loại trừ Pauli và tính bất đối xứng của hàm sóng toàn phần, ta thu được bảng dưới đây.

L	S	j	$^{2s+1}L_j$	Bậc suy biến
0	0	0	$^1S_0$	1
1	1	2	$^3P_2$	
1	1	1	$^3P_1$	3
1	1	0	$^3P_0$	
2	0	2	$^1D_2$	1

(b) Theo quy tắc Hund, trạng thái $^3P_0$ có năng lượng thấp nhất.

3028

Hạt meson π^- mang điện tích âm (một hạt giả vô hướng: spin bằng không,

có tính lẻ) ban đầu được liên kết ở trạng thái hàm sóng Coulomb năng lượng cực tiểu quay quanh một đơteron. Nó bị bắt bởi đơteron đó (một proton và một nơtron ở trạng thái $^3S_1$), rồi biến thành một cặp nơtron:

$$\pi^- + d \rightarrow n + n\,.$$

(a) Mômen xung lượng quỹ đạo của cặp nơtron đó bằng bao nhiêu?

(b) Mômen xung lượng spin toàn phần của chúng bằng bao nhiêu?

(c) Xác suất tìm thấy cả hai spin nơtron theo hướng ngược với hướng của đơteron là bao nhiêu?

(d) Nếu spin của đơteron ban đầu phân cực 100% theo hướng $\hat{\mathbf{R}}$ thì sự phân bố góc của xác suất phát xạ nơtron (trên một đơn vị góc khối) của một nơtron mà spin của nó ngược chiều với spin của đơteron ban đầu là bao nhiêu?

Bạn có thể cần biết một số hàm cầu bậc thấp nhất (chưa chuẩn hóa)

$$Y_0^0 = 1, \qquad Y_1^{\pm 1} = \mp \sin\theta\, e^{\pm i\phi}\,,$$
$$Y_1^0 = \cos\theta, \quad Y_2^{\pm 1} = \mp \sin 2\theta\, e^{\pm i\phi}\,.$$

(*CUS*)

Lời giải:

(a), (b) Do tính bảo toàn chẵn lẻ trong các tương tác mạnh, ta có

$$p(\pi^-)\,p(d)\,(-1)^{L_1} = p(n)\,p(n)\,(-1)^{L_2}\,,$$

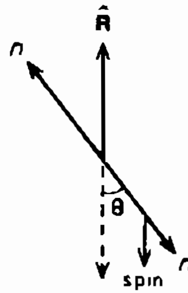
ở đây L_1, L_2 tương ứng là các mômen xung lượng góc quỹ đạo của $\pi^- + d$ và $n + n$. Do π^- bị bắt ở trạng thái năng lượng cực tiểu trong trường thế Coulomb trước khi xảy ra phản ứng nên $L_1 = 0$. Bởi vì $p(\pi^-) = -1$, $p(d) = 1$, $p(n)\,p(n) = 1$, ta có

$$(-1)^{L_2} = -1\,,$$

suy ra

$$L_2 = 2m + 1,\ m = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots\,.$$

Đơteron có $J = 1$ và π^- có spin bằng không vì thế $J = 1$ trước khi phản ứng xảy ra. Bảo toàn mômen xung lượng yêu cầu sau phản ứng, $\mathbf{L}_2 + \mathbf{S} = \mathbf{J}$. Tính đồng nhất của n và n đòi hỏi hàm sóng toàn phần phải là phản đối xứng. Như vậy do hàm sóng không gian đã là phản đối xứng nên hàm sóng spin phải là đối xứng, tức là $S = 1$ và như vậy $L_2 = 2$, 1 hoặc 0. Do L_2 là lẻ nên ta phải có $L_2 = 1$, $S = 1$.



Hình 3.5

Mômen quỹ đạo toàn phần và mômen spin toàn phần đều bằng $\sqrt{1(1+1)}\,\hbar = \sqrt{2}\,\hbar$.

(c) Giả thiết spin đơteron nằm theo phương $J_z = 1\hbar$ trước phản ứng. Nếu cả hai nơtron có spin theo hướng ngược lại ta phải có $S_z = -1\hbar$, $L_z = 2\hbar$, điều này là không thể vì $L_2 = 1$. Do đó, xác suất bằng không.

(d) Chọn trục z trùng với phương $\hat{\mathbf{R}}$. Như vậy, trạng thái ban đầu là $|J, J_z\rangle = |1, 1\rangle$. Trong biểu diễn không liên kết, trạng thái là $|L, L_z, S, S_z\rangle$, với $L = 1$, $S = 1$. Như vậy

$$|1, 1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\,|1, 0, 1, 1\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}\,|1, 1, 1, 0\rangle .$$

Trạng thái

$$|1, 1, 1, 0\rangle = Y_1^1(\theta, \phi)\,|1, 0\rangle = -\sqrt{3/8\pi}\,\sin\theta e^{i\phi}\,|1, 0\rangle$$

có $S_z = 0$ và do đó phải có một nơtron có $s_z = -\hbar/2$. Như vậy, phân bố xác suất cần có là

$$dP(\theta, \phi)/d\Omega = \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta = \frac{3}{16\pi}\sin^2\theta .$$

3029

Một hyperon Ω^- (spin 3/2, khối lượng 1672 MeV/c^2, tính chẵn lẻ +) có thể phân rã qua tương tác yếu thành một hyperon Λ (spin 1/2, khối lượng 1116 MeV/c^2, tính chẵn lẻ +) và và một meson K^-(spin 0, khối lượng MeV/c^2, tính chẵn lẻ −), tức là, $\Omega^- \to \Lambda + K^-$.

(a) Dạng tổng quát nhất của phân bố góc của các meson K^- đối với phương spin của Ω^- trong trường hợp khi Ω^- có thành phần của mômen xung lượng theo trục z có giá trị lớn nhất có thể, tức là trạng thái ban đầu $|\Omega_j^m\rangle = |\Omega_{3/2}^{+3/2}\rangle$ sẽ như thế nào. (Giả thiết rằng Ω^- ở trạng thái nghỉ).

(b) Các giới hạn nào có thể áp đặt lên dạng phân bố góc nếu tính chẵn lẻ phải được bảo toàn trong quá trình phân rã?

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Trạng thái ban đầu của hệ là $|3/2, 3/2\rangle$, ở đây các giá trị là mômen xung lượng quỹ đạo và spin của Ω^-. Phần spin của trạng thái cuối cùng là $|1/2, s_z\rangle|0, 0\rangle = |1/2, s_z\rangle$, và phần quỹ đạo là $Y_{lm}(\theta, \varphi) = |l, m\rangle$. Như vậy, trạng thái toàn phần cuối cùng của hệ là

$$|l, m\rangle\,|1/2, s_z\rangle\,.$$

Do bảo toàn mômen xung lượng $l = 1, 2; m = 3/2 - s_z$. Như vậy, trạng thái cuối cùng là một sóng p nếu $l = 1$, trạng thái là $|1, 1\rangle|1/2, 1/2\rangle$; hoặc là một sóng d nếu $l = 2$, trạng thái là một tổ hợp của $|2, 2\rangle|1/2, -1/2\rangle$ và $|2, 1\rangle|1/2, 1/2\rangle$.

Như vậy, các hàm sóng là

$$\psi_p = Y_{11}(\theta, \varphi)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},$$

$$\psi_d = \left[\sqrt{\frac{4}{5}}\,|2, 2\rangle\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{1}{5}}\,|2, 1\rangle\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\right]$$
$$= \begin{pmatrix}-\sqrt{\frac{1}{5}}\,Y_{21}(\theta, \varphi)\\ \sqrt{\frac{4}{5}}\,Y_{22}(\theta, \varphi)\end{pmatrix},$$

và

$$\psi = a_d\,\psi_d + a_p\,\psi_p$$
$$= \begin{pmatrix}a_pY_{11}(\theta, \varphi) - a_d\sqrt{\frac{1}{5}}\,Y_{21}(\theta, \varphi)\\ \sqrt{\frac{4}{5}}\,a_dY_{22}(\theta, \varphi)\end{pmatrix}.$$

Do đó

$$\psi^* \psi = \frac{3}{8\pi} \sin^2\theta \left[|a_p|^2 + |a_d|^2 - 2Re\, a_p^* a_d \cos\theta \right],$$

tức là cường độ các hạt phát ra là

$$I \propto \sin^2\theta (1 + \alpha\cos\theta),$$

ở đây

$$\alpha = -2Re\, a_p^* a_d / (|a_p|^2 + |a_d|^2).$$

Đây là dạng tổng quát nhất của phân bố góc của các meson K^-.

(b) Nếu tính chẵn lẻ được bảo toàn trong quá trình phân rã thì trạng thái cuối cùng sẽ phải có tính chẵn lẻ dương, tức là

$$(-1)^l P_K P_\Lambda = +1.$$

Do

$$P_K P_\Lambda = (-1)(+1) = -1,$$

ta có $l = 1$. Dẫn đến

$$\psi_f = Y_{11}(\theta, \varphi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

và

$$\psi_f^* \psi_f = \frac{3}{8\pi} \sin^2\theta = \frac{3}{8\pi} (1 - \cos^2\theta).$$

Như vậy, bảo toàn tính chẵn lẻ áp đặt cho phân bố góc phải có dạng

$$I \propto (1 - \cos^2\theta).$$

3030

Cho hai mômen xung lượng góc $\mathbf{J}_1$ và $\mathbf{J}_2$ (ví dụ, **L** và **S**) và các hàm sóng tương ứng, ở đây $j_1 = 1$ và $j_2 = 1/2$. Tính các hệ số Clebsch-Gordan cho các trạng thái với $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$, $m = m_1 + m_2$, trong đó:

(a) $j = 3/2$, $m = 3/2$,

(b) $j = 3/2$, $m = 1/2$.

Xét các phản ứng

$$\begin{aligned} K^- p &\to \Sigma^- \pi^+ , \\ &\to \Sigma^+ \pi^- , \\ &\to \Sigma^0 \pi^0 , \\ K^- n &\to \Sigma^- \pi^0 , \\ &\to \Sigma^0 \pi^- . \end{aligned}$$

Giả thiết các phản ứng này xảy ra qua một quá trình cộng hưởng và do đó là qua một trạng thái thuần spin I nào đó. Dựa trên sự bảo toàn spin I, hãy tìm tỉ số tiết diện của các phản ứng trên

(c) đối với trạng thái cộng hưởng $I = 1$,

(d) đối với trạng thái cộng hưởng $I = 0$.

Sử dụng các hệ số Clebsch-Gordan đã cho. Các spin I của K, n, Σ, và π tương ứng bằng 1/2, 1/2, 1 và 1

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Do $j_1 = 1$, $j_2 = \frac{1}{2}$, ta có

$$|3/2, 3/2\rangle = |1, 1\rangle |1/2, 1/2\rangle .$$

(b) Định nghĩa toán tử $J_- = J_{1-} + J_{2-}$, ta có

$$J_- |3/2, 3/2\rangle = (J_{1-} + J_{2-}) |1, 1\rangle |1/2, 1/2\rangle ,$$

hoặc sử dụng các tính chất của J_- (xem **Bài tập 3008**),

$$\hbar\sqrt{3} |3/2, 1/2\rangle = \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle |1/2, 1/2\rangle + \hbar |1, 1\rangle |1/2, -1/2\rangle ,$$

và do đó

$$|3/2, 1/2\rangle = \sqrt{2/3} |1, 0\rangle |1/2, 1/2\rangle + \sqrt{1/3} |1, 1\rangle |1/2, -1/2\rangle .$$

Để tính các tiết diện phản ứng tương đối ta sử dụng biểu diễn liên kết để

mô tả các trạng thái spin I ban đầu và cuối cùng

$$|K^-p\rangle = |1/2, -1/2\rangle|1/2, 1/2\rangle = \sqrt{1/2}|1, 0\rangle - \sqrt{1/2}|0, 0\rangle,$$
$$|\Sigma^-\pi^+\rangle = |1, -1\rangle|1, 1\rangle = \sqrt{1/6}|2, 0\rangle - \sqrt{1/2}|1, 0\rangle + \sqrt{1/3}|0, 0\rangle,$$
$$|\Sigma^+\pi^-\rangle = |1, 1\rangle|1, -1\rangle = \sqrt{1/6}|2, 0\rangle + \sqrt{1/2}|1, 0\rangle + \sqrt{1/3}|0, 0\rangle,$$
$$|\Sigma^0\pi^0\rangle = |1, 0\rangle|1, 0\rangle = \sqrt{2/3}|2, 0\rangle - \sqrt{1/3}|0, 0\rangle,$$
$$|K^-n\rangle = |1/2, -1/2\rangle|1/2, -1/2\rangle = |1, -1\rangle,$$
$$|\Sigma^-\pi^0\rangle = |1, -1\rangle|1, 0\rangle = \sqrt{1/2}|2, -1\rangle - \sqrt{1/2}|1, -1\rangle,$$
$$|\Sigma^0\pi^-\rangle = |1, 0\rangle|1, -1\rangle = \sqrt{1/2}|2, -1\rangle + \sqrt{1/2}|1, -1\rangle.$$

Với các phản ứng K^-p trải qua trạng thái cộng hưởng $I = 1$, các trạng thái cuối $|\Sigma^-\pi^+\rangle$ đóng góp $-\sqrt{\frac{1}{2}}|1, 0\rangle$, $|\Sigma^+\pi^-\rangle$ đóng góp $\sqrt{\frac{1}{2}}|1, 0\rangle$, trong khi đó $|\Sigma^0\pi^0\rangle$ không đóng góp. Như vậy

$$\sigma(\Sigma^-\pi^+) : \sigma(\Sigma^+\pi^-) : \sigma(\Sigma^0\pi^0) = 1 : 1 : 0.$$

Tương tự cho các phản ứng K^-n, ta có

$$\sigma(\Sigma^-\pi^0) : \sigma(\Sigma^0\pi^-) = 1 : 1.$$

Chỉ có các phản ứng K^-p là trải qua trạng thái cộng hưởng $I = 0$. Suy luận tương tự dẫn tới tỉ số tiết diện phản ứng như sau

$$\sigma(\Sigma^-\pi^+) : \sigma(\Sigma^+\pi^-) : \sigma(\Sigma^0\pi^0) = 1 : 1 : 1.$$

3031

(a) Tính các hệ số Clebsch-Gordan cho các trạng thái với $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$, $M = m_1 + m_2$, ở đây $j_1 = 1$ và $j_2 = 1/2$, và $j = 3/2, M = 1/2$ cho các giá trị khác nhau có thể của m_1 và m_2.

(b) Xét các phản ứng:

$$\pi^+p \to \pi^+p \quad \text{(i)}$$
$$\pi^-p \to \pi^-p \quad \text{(ii)}$$
$$\pi^-p \to \pi^0n \quad \text{(iii)}$$

Các phản ứng bảo toàn spin đồng vị này có thể xảy ở trạng thái spin đồng vị $I = 3/2$ (Δ cộng hưởng) hoặc trạng thái $I = 1/2$ (N^* cộng hưởng). Hãy tính tỉ số các tiết diện ngang, $\sigma_{\text{i}} : \sigma_{\text{ii}} : \sigma_{\text{iii}}$, với năng lượng tương ứng của cộng hưởng Δ và cộng hưởng N^*. Tại một năng lượng bạn có thể bỏ qua hiệu ứng gây bởi các trạng thái spin đồng vị khác. Lưu ý rằng pion là trạng thái spin đồng vị $I = 1$ và nucleon là trạng thái spin đồng vị $I = 1/2$.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Do $M = m_1 + m_2 = 1/2, (m_1, m_2)$ chỉ có thể là $(1, -1/2)$ hay $(0, 1/2)$. Xét

$$|3/2, 3/2\rangle = |1, 1\rangle\, |1/2, 1/2\rangle .$$

Do

$$M_- \,|3/2, 3/2\rangle = \sqrt{3}\,|3/2, 1/2\rangle ,$$

và

$$\begin{aligned} M_- \,|3/2, 3/2\rangle &= (M_{1-} + M_{2-})\,|1, 1\rangle\, |1/2, 1/2\rangle \\ &= \sqrt{2}\,|1, 0\rangle\, |1/2, 1/2\rangle + |1, 1\rangle\, |1/2, -1/2\rangle , \end{aligned}$$

ta có

$$\begin{aligned} \langle 1, 1, 1/2, -1/2\,|3/2, 1/2\rangle &= 1/\sqrt{3} , \\ \langle 1, 0, 1/2, 1/2\,|3/2, 1/2\rangle &= \sqrt{2/3} . \end{aligned}$$

(b) Do

$$\begin{aligned} &\pi^+ = |1, 1\rangle, \quad \pi^0 = |1, 0\rangle, \quad \pi^- = |1, -1\rangle , \\ &p = |1/2, 1/2\rangle, \quad n = |1/2, -1/2\rangle , \end{aligned}$$

ta có

$$\begin{aligned} |\pi^+ p\rangle &= |1, 1\rangle\, |1/2, 1/2\rangle = |3/2, 3/2\rangle , \\ |\pi^- p\rangle &= |1, -1\rangle\, |1/2, 1/2\rangle = a\,|3/2, -1/2\rangle + b\,|1/2, -1/2\rangle , \\ |\pi^0 n\rangle &= |1, 0\rangle\, |1/2, -1/2\rangle = c\,|3/2, -1/2\rangle + d\,|1/2, -1/2\rangle . \end{aligned}$$

Từ bảng các hệ số Clebsch-Gordan, ta tìm được $a = \sqrt{1/3}$, $b = -\sqrt{2/3}$, $c = \sqrt{2/3}$, $d = \sqrt{1/3}$. Đối với trạng thái cộng hưởng Δ, $I = 3/2$ tỉ số của các

tiết diện ngang là

$$\sigma_{\text{i}} : \sigma_{\text{ii}} : \sigma_{\text{iii}} = 1 : |a|^4 : |ac|^2 = 1 : \frac{1}{9} : \frac{2}{9}.$$

Đối với trạng thái cộng hưởng N^*, $I = 1/2$, và các tỉ số là

$$\sigma_{\text{i}} : \sigma_{\text{ii}} : \sigma_{\text{iii}} = 0 : |b|^4 : |bd|^2 = 0 : \frac{4}{9} : \frac{2}{9}.$$

3032

Xét một electron trong một từ trường đều theo phương z. Giả thiết kết quả của một phép đo cho thấy spin của electron hướng theo trục y dương tại $t = 0$. Hãy tìm vectơ trạng thái Schrödinger cho spin đó và độ phân cực trung bình (giá trị kì vọng của s_x) theo phương x với $t > 0$.

(Wisconsin)

Lời giải:

Vì ta chỉ quan tâm đến trạng thái spin và từ trường là đều trong không gian nên ta có thể bỏ qua phần không gian của hàm sóng. Như vậy, Hamiltonian có thể được lấy như sau

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \mu_e \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \hbar\omega\sigma_z ,$$

ở đây $\boldsymbol{\mu} = -\boldsymbol{\mu}_e\sigma$, $\omega = \mu_e B/\hbar = eB/2mc$, μ_e là magneton Bohr $\frac{e\hbar}{2mc}$. Do electron ban đầu hướng theo trục y nên hàm sóng spin ban đầu là

$$\psi(t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} .$$

Gọi hàm sóng spin tại một thời điểm t sau đó là $\binom{\alpha}{\beta}$. Phương trình Schrödinger

$$i\hbar\, d\psi/dt = H\psi$$

dẫn đến

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot\alpha \\ \dot\beta \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} ,$$

hay

$$\dot\alpha = -i\omega\alpha, \quad \dot\beta = i\omega\beta ,$$

có nghiệm

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t}\,\alpha_0 \\ e^{i\omega t}\,\beta_0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ i\,e^{-i\omega t} \end{pmatrix} .$$

Như vậy

$$\begin{aligned} \langle s_x \rangle &= \langle \psi(t) \,|\, \hat{s}_x \,|\, \psi(t) \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} \langle \psi \,|\, \sigma_x \,|\, \psi \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{1}{2} \left(e^{i\omega t} \quad -ie^{-i\omega t} \right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ i\,e^{i\omega t} \end{pmatrix} \\ &= \frac{i\hbar}{4} \left(e^{2i\omega t} - e^{-2i\omega t} \right) \\ &= -\frac{\hbar}{2} \sin(2\omega t) . \end{aligned}$$

3033

Xét một electron trong một từ trường hướng theo phương z. Spin của nó được đo (ở thời điểm t_0) chỉ theo hướng y dương. Xác định độ phân cực theo phương x và z đối với $t > t_0$ (tức là giá trị kì vọng của $2s_x$ và $2s_z$)?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Phương trình Schrödinger đối với vectơ trạng thái spin là

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \mu_e \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} ,$$

ở đây $\mu_e = |e|\hbar/2m_e c$ là độ lớn của mômen từ của một electron. Do **B** nằm theo phương z nên phương trình trên trở thành

$$i\hbar\,\partial_t \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \mu_e B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} ,$$

hay

$$\begin{cases} i\hbar\,\partial_t\, a(t) = \mu_e B a(t) , \\ i\hbar\,\partial_t\, b(t) = -\mu_e B b(t) . \end{cases}$$

Các nghiệm là

$$a(t) = a(t_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mu_e B(t-t_0)}\,,$$

$$b(t) = b(t_0)\, e^{\frac{i}{\hbar}\mu_e B(t-t_0)}\,.$$

Tại thời điểm t_0, spin của electron nằm theo phương y. Như vậy

$$s_y \begin{pmatrix} a(t_0) \\ b(t_0) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t_0) \\ b(t_0) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a(t_0) \\ b(t_0) \end{pmatrix},$$

hay

$$\begin{cases} -i\, b(t_0) = a(t_0)\,, \\ i\, a(t_0) = b(t_0)\,. \end{cases}$$

Điền kiện chuẩn hóa

$$|\, a(t_0)\,|^2 + |\, b(t_0)\,|^2 = 1\,,$$

dẫn đến

$$|\, a(t_0)\,|^2 = |\, b(t_0)\,|^2 = \frac{1}{2}\,.$$

Do $\frac{b(t_0)}{a(t_0)} = i$, nên ta có thể lấy

$$a(t_0) = 1/\sqrt{2}, \quad b(t_0) = i/\sqrt{2}\,.$$

Như vậy ở $t > t_0$ sự phân cực theo phương x và z tương ứng là

$$\begin{aligned} \langle 2s_x \rangle &= \hbar(a^*, b^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\ &= \hbar(a^* b + b^* a) = -\hbar \sin\left[\frac{2\mu_e}{\hbar} B(t-t_0)\right]; \\ \langle 2s_z \rangle &= \hbar(a^*, b^*) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\ &= \hbar(a^* a - b^* b) = 0\,. \end{aligned}$$

3034

Hai hạt có spin 1/2 tạo nên một hệ phức hợp. Spin A ở trạng thái riêng $S_z = +1/2$ và spin B ở trạng thái riêng $S_x = +1/2$. Xác suất để một phép đo spin toàn phần cho giá trị bằng không là bao nhiêu?

(*CUS*)

Lời giải:

Trong biểu diễn không liên kết, trạng thái ở đó spin liên kết bằng không có thể viết dưới dạng

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|S_{Az} = \frac{1}{2}\right\rangle\left|S_{Bz} = -\frac{1}{2}\right\rangle - \left|S_{Az} = -\frac{1}{2}\right\rangle\left|S_{Bz} = \frac{1}{2}\right\rangle\right),$$

ở đây S_{Az} và S_{Bz} kí hiệu các thành phần theo phương z của các spin A và B tương ứng. Khi các hạt spin $\frac{1}{2}$ này ở trạng thái

$$|Q\rangle = |S_{Az} = +1/2\rangle\,|S_{Bx} = +1/2\rangle\,.$$

thì xác suất tìm thấy spin toàn phần bằng không là

$$P = |\langle 0|Q\rangle|^2\,.$$

Trong biểu diễn của $\hat{\mathbf{S}}^2$ và $\hat{S}_z$, toán tử mômen spin $\hat{S}_x$ được định nghĩa bằng

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}.$$

Giải phương trình riêng của $\hat{S}_x$, ta thấy rằng hàm riêng của nó có thể khai triển qua biểu diễn của $\mathbf{S}^2$ và S_z vì

$$|S_x = +1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_z = 1/2\rangle + |S_z = -1/2\rangle)\,.$$

Như vậy

$$\left\langle S_z = -\frac{1}{2}\middle|S_x = +\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left\langle S_z = -\frac{1}{2}\middle|S_z = \frac{1}{2}\right\rangle + \left\langle S_z = -\frac{1}{2}\middle|S_z = -\frac{1}{2}\right\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

và do đó

$$\langle 0\,|\,Q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left\langle S_{Az}=\frac{1}{2}\,\middle|\,S_{Az}=+\frac{1}{2}\right\rangle\left\langle S_{Bz}=-\frac{1}{2}\,\middle|\,S_{Bx}=+\frac{1}{2}\right\rangle\right.$$
$$\left. -\left\langle S_{Az}=-\frac{1}{2}\,\middle|\,S_{Az}=+\frac{1}{2}\right\rangle\left\langle S_{Bz}=\frac{1}{2}\,\middle|\,S_{Bx}=+\frac{1}{2}\right\rangle\right)$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\langle S_{Bz}=-\frac{1}{2}\,\middle|\,S_{Bx}=+\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{2}\,.$$

Vậy

$$P = |\langle 0\,|\,Q\rangle|^2 = \frac{1}{4} = 25\%\,.$$

3035

(a) Một electron được quan sát thấy có spin chỉ theo phương z của một hệ tọa độ vuông góc. Xác suất để một quan sát thứ hai sẽ cho thấy spin chỉ theo hướng làm với trục z một góc θ trong mặt phẳng $x-z$ là bao nhiêu?

(b) Spin tổng cộng của nơtron và proton trong một đơteron là một trạng thái bội ba. Spin tổng cộng được quan sát thấy là song song với trục z của một hệ tọa độ vuông góc. Xác suất để một quan sát lần thứ hai sẽ cho thấy spin của proton song song với trục z là bao nhiêu?

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Trạng thái spin ban đầu của electron là

$$|\,\psi_0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}.$$

Trạng thái mà spin tương ứng nằm trong mặt phẳng xz và lập với phương z một góc θ là

$$|\,\psi\rangle = \begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}.$$

Như vậy, xác suất để lần quan sát thứ hai cho thấy spin nằm trên mặt xz

làm thành một góc θ so với trục z là

$$P(\theta) = |\langle\psi|\psi_0\rangle|^2 = \left|\left(\cos\frac{\theta}{2}, \sin\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right|^2$$

$$= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right).$$

(b) Trạng thái spin ban đầu của hệ nơtron - proton là

$$|\psi_0\rangle = |1, 1\rangle = |1/2, 1/2\rangle_n |1/2, 1/2\rangle_p .$$

Giả thiết lần quan sát thứ hai cho thấy spin của proton song song với trục z. Do spin của nơtron song song với spin của proton trong đơteron, nên trạng thái cuối cùng vẫn được duy trì như trước

$$|\psi_f\rangle = |1/2, 1/2\rangle_n |1/2, 1/2\rangle_p .$$

Bởi vậy, xác suất lần quan sát thứ hai cho thấy spin của proton song song với trục z là 1.

3036

Đơteron là một trạng thái liên kết của một proton và một nơtron có mômen xung lượng toàn phần tổng $J = 1$. Về cơ bản nó là một trạng thái S ($L = 0$) với một phần pha trộn nhỏ của trạng thái D ($L = 2$).

(a) Giải thích tại sao trạng thái P không thể đóng góp được gì trong trường hợp này.

(b) Giải thích tại sao trạng thái G không thể đóng góp được gì trong trường hợp này.

(c) Tính mômen từ của hệ $n - p$ đối với trạng thái D thuần túy có $J = 1$. Giả thiết rằng các spin n và p liên kết với nhau để tạo nên spin tổng cộng S sau đó liên kết với mômen quỹ đạo L để tạo nên mômen xung lượng toàn phần J. Biểu diễn kết quả của bạn theo magneton hạt nhân. Các mômen từ của proton và nơtron lần lượt là 2, 79 và $-1, 91$ magneton hạt nhân.

(*CUS*)

Lời giải:

(a) Các tính chẵn lẻ của S và D là dương, trong khi tính chẵn lẻ của trạng thái P là âm. Do sự bảo toàn tính chẵn lẻ trong tương tác mạnh, một hệ lượng

tử ban đầu là một trạng thái S không thể có thành phần trạng thái P tại bất kì thời điểm nào sau đó.

(b) Các giá trị có thể của spin đối với một hệ gồm một proton và một nơtron là 1 và 0. Chúng ta có $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ và $J = 1$. Nếu $S = 0$, $L = 1$, thì hệ sẽ ở trạng thái P, điều này bị loại bỏ như ta đã thấy ở câu (a). Các giá trị cho phép như vậy chỉ còn $S = 1$, $L = 2, 1, 0$. Bởi vậy, một trạng thái G ($L = 4$) không thể có đóng góp vào trạng thái đó.

(c) Spin tổng cộng là $\mathbf{S} = \mathbf{s}_p + \mathbf{s}_n$. Đối với một trạng thái D thuần túy với $J = 1$, mômen quỹ đạo (đối với khối tâm của n và p) là $L = 2$ và spin tổng phải là $S = 1$. Mômen từ toàn phần tổng xuất phát từ liên kết của mômen từ của spin, $\boldsymbol{\mu}$, với mômen từ quỹ đạo, $\boldsymbol{\mu}_L$, ở đây $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_p + \boldsymbol{\mu}_n$, $\boldsymbol{\mu}_p$, $\boldsymbol{\mu}_n$ tương ứng là mômen từ spin của p và n.

Giá trị trung bình của thành phần của $\boldsymbol{\mu}$ theo hướng của spin toàn phần $\mathbf{S}$ là

$$\boldsymbol{\mu}_s = \frac{(g_p \mu_N \mathbf{s}_p + g_n \mu_N \mathbf{s}_n) \cdot \mathbf{S}}{\mathbf{S}^2} \mathbf{S} = \frac{1}{2} (g_p + g_n) \mu_N \mathbf{S},$$

ở đây

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c}, \quad g_p = 5{,}58, \quad g_n = -3{,}82,$$

Do $\mathbf{s}_p = \mathbf{s}_n = \frac{1}{2}\mathbf{S}$.

Chuyển động của proton đối với khối dẫn tới một mômen từ, trong khi chuyển động của nơtron không dẫn tới sự xuất hiện của mômen từ vì nó là hạt không mang điện. Như vậy

$$\boldsymbol{\mu}_L = \mu_N \mathbf{L}_p.$$

ở đây $\mathbf{L}_p$ là mômen xung lượng của proton đối với khối tâm. Do $\mathbf{L}_p + \mathbf{L}_n = \mathbf{L}$ và ta có thể giả thiết $\mathbf{L}_p = \mathbf{L}_n$, ta có $\mathbf{L}_p = \mathbf{L}/2$ (khối tâm nằm tại trung điểm của đường nối, coi $m_p \approx m_n$). Rút ra, $\boldsymbol{\mu}_L = \mu_N \mathbf{L}/2$.

Mômen từ liên kết toàn phần theo phương của $\mathbf{J}$ như vậy sẽ bằng

$$\mu_T = \frac{\left[\frac{1}{2}\mu_N \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} + \frac{1}{2}(g_p + g_n)\mu_N \mathbf{S} \cdot \mathbf{J}\right] \mathbf{J}}{J(J+1)}.$$

Do $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$. Với $J = 1$, $L = 2$, $S = 1$ và như vậy $J^2 = 2$, $L^2 = 6$, $S^2 = 2$, ta có $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = -3$ và do đó $\mathbf{L} \cdot \mathbf{J} = 3$, $\mathbf{S} \cdot \mathbf{J} = -1$. Như vậy

$$\mu_I = \left[\frac{1}{2}\mu_N \cdot 3 + \frac{1}{2}(g_p + g_n)\mu_N(-1)\right] \mathbf{J}/2$$

$$= \left[1,5 - \frac{1}{2}(g_p + g_n)\right]\frac{1}{2}\mu_N \mathbf{J} = 0,31\mu_N \mathbf{J}\,.$$

Chọn hướng J trùng với phương z và chọn giá trị cực đại $J_z = 1$, ta có $\mu_I = 0,31\mu_N$.

3037

Thí nghiệm Stern-Gerlach bước đầu đã xác lập được thành phần z của spin điện tử là $-\hbar/2$. Một từ trường đều theo phương x có độ lớn ra B (sử dụng đơn vị cgs) sau đó được bật lên tại thời điểm $t = 0$.

(a) Hãy dự đoán kết quả của một phép đo đơn lẻ thành phần theo phương z của spin sau một khoảng thời gian T.

(b) Nếu thay vì đo thành phần z của spin, ta đo thành phần spin theo phương x, hãy dự đoán kết quả của phép đo đơn lẻ như vậy sau một khoảng thời gian T.

(Berkeley)

Lời giải:

Phương pháp 1

Hàm sóng spin $\binom{a}{b}$ thỏa mãn

$$i\hbar\,\partial_t \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{e\hbar B}{2mc}\sigma_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}\,.$$

ở đây $\omega = eB/2mc$, hay

$$\begin{cases} i\dot{a} = \omega b\,, \\ i\dot{b} = \omega a\,. \end{cases}$$

Như vậy

$$\ddot{a} = -i\omega\dot{b} = -\omega^2 a\,,$$

với nghiệm là

$$a = A\,e^{i\omega t} + C\,e^{-i\omega t}\,,$$

$$b = \frac{i}{\omega}\,\dot{a} = -(A\,e^{i\omega t} - C\,e^{-i\omega t})\,,$$

ở đây A và C là các hằng số tùy ý. Từ điều kiện ban đầu $a(0) = 0$ và $b(0) = 1$, do spin ở trạng thái ban đầu hướng theo phương z, ta được $A = -1/2$, $C = 1/2$. Như vậy

$$\begin{cases} a = \frac{1}{2}\left(e^{-i\omega t} - e^{i\omega t}\right) = -i\sin\omega t\,, \\ b = \frac{1}{2}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right) = \cos\omega t\,, \end{cases}$$

và hàm sóng tại thời điểm t là

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} -i\sin\omega t \\ \cos\omega t \end{pmatrix}.$$

(a) Tại $t = T$,

$$\psi(T) = \begin{pmatrix} -i\sin\omega T \\ \cos\omega t \end{pmatrix} = -i\sin\omega T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \cos\omega T \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Do $\binom{1}{0}$ và $\binom{0}{1}$ là các vectơ riêng của σ_z với các trị riêng tương ứng $+1$ và -1 nên xác suất để thành phần z đo được của spin là dương là $\sin^2\omega T$; xác suất để thành phần z là âm là $\cos^2\omega T$.

(b) Trong biểu diễn chéo hóa của σ_z, các vectơ riêng của σ_x là

$$\psi(\sigma_x = 1) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \psi(\sigma_x = -1) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Do ta có thể viết

$$\begin{aligned} \psi(T) = \begin{pmatrix} -i\sin\omega T \\ \cos\omega T \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega T}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\omega T}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega T}\,\psi(\sigma_x = 1) + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\omega T}\,\psi(\sigma_x = -1)\,, \end{aligned}$$

nên xác suất để thành phần x của spin được đo là dương và âm là như nhau và bằng

$$\left|\frac{e^{-i\omega T}}{\sqrt{2}}\right|^2 = \left|\frac{e^{i\omega T}}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}.$$

Phương pháp 2

Hamiltonian đối với năng lượng spin là

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} = eB\hbar\sigma_x/2mc\,.$$

Các trạng riêng của σ_x là

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}.$$

Ta có thể viết hàm sóng ban đầu như sau

$$\psi(t=0) = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right].$$

Khi đó, từ Hamiltonian trên suy ra

$$\psi(t) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}e^{-i\omega t} - \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}e^{i\omega t}, \quad \omega = \frac{eB}{2mc}.$$

(a) Do

$$\psi(t) = \begin{pmatrix}-i\sin\omega t\\ \cos\omega t\end{pmatrix},$$

các xác suất tại $t = T$ là

$$P_{z\uparrow} = \sin^2\omega T, \quad P_{z\downarrow} = \cos^2\omega T.$$

(b) Như ở phương pháp 1 ở trên,

$$\begin{cases} P_{x\uparrow} = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega t}\right|^2 = \frac{1}{2}, \\ P_{x\downarrow} = \frac{1}{2}. \end{cases}$$

3038

Một nguyên tử kim loại kiềm ở trạng thái cơ bản đi qua một thiết bị Stern-Gerlach được điều chỉnh sao cho các nguyên tử truyền qua có spin hướng theo hướng $+z$. Nguyên tử sau đó ở trong một từ trường H hướng theo phương x trong một khoảng thời gian τ. Khi kết thúc khoảng thời gian này xác suất để nguyên tử đi qua máy lọc Stern-Gerlach cho các spin theo hướng $-z$ là bao nhiêu? Xác suất này có thể bằng 1 được không? Giải thích.

(Berkeley)

Lời giải:

Hamiltonian

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H} = \frac{|e|\hbar H}{2mc}\sigma_x \equiv \hbar\omega\sigma_x, \quad \omega = \frac{|e|H}{2mc},$$

dẫn đến phương trình chuyển động

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \hbar\omega\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \hbar\omega\begin{pmatrix}\psi_2\\ \psi_1\end{pmatrix},$$

hay

$$\begin{cases} i\dot{\psi}_1 = \omega\psi_2 . \\ i\dot{\psi}_2 = \omega\psi_1 . \end{cases}$$

và do đó

$$\ddot{\psi}_1 + \omega^2\psi_1 = 0 .$$

Nghiệm là $\psi = \binom{\psi_1}{\psi_2}$, với

$$\begin{cases} \psi_1(t) = ae^{i\omega t} + be^{-i\omega t} , \\ \psi_2(t) = \dfrac{i}{\omega}\dot{\psi}_1 = -ae^{i\omega t} + be^{-i\omega t} . \end{cases}$$

Từ điều kiện ban đầu

$$\psi(t=0) = \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$$

suy ra $a = b = 1/2$. Như vậy

$$\psi = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\\ -e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos\omega t\\ -i\sin\omega t\end{pmatrix}$$

$$= \cos\omega t\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} - i\sin\omega t\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} .$$

Trong biểu thức trên $\binom{0}{1}$ là vectơ riêng của σ_z đối với trị riêng -1. Như vậy, xác suất để các spin theo hướng z tại thời điểm τ sau khi nguyên tử đi qua máy lọc lựa Stern-Gerlach là

$$\left|(0 \;\; 1)\begin{pmatrix}\cos\omega\tau\\ -i\sin\omega\tau\end{pmatrix}\right|^2 = \sin^2\omega\tau = \frac{1-\cos 2\omega\tau}{2} .$$

Xác suất bằng 1, nếu

$$1 - \cos 2\omega\tau = 2\,,$$

hay

$$\cos 2\omega\tau = -1\,,$$

tức là tại thời điểm

$$\tau = \frac{(2n+1)\,\pi}{2\omega} = (2n+1)\,\frac{mc\pi}{|\,e\,|\,H}\,.$$

Như vậy, xác suất sẽ bằng 1 tại các thời điểm $\tau = (2n+1)mc\pi/|e|H$.

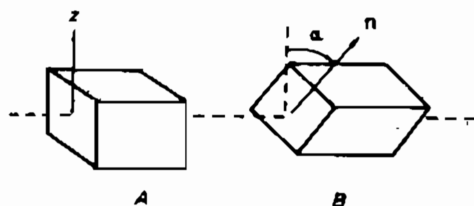
3039

Một chùm hạt có spin được cho đi qua một máy Stern-Gerlach chia chùm này thành hai thành phân tách biệt trong không gian phụ thuộc vào số lượng tử m của các hạt. Một trong các chùm tạo thành được bỏ đi và chùm kia được đưa qua một máy tương tự, từ trường của máy đó có độ lệch α so với phương từ trường của máy thứ nhất (xem Hình 3.6). Tính tỉ số các số hạt xuất hiện trong hai chùm đi ra khỏi máy thứ hai là bao nhiêu? Suy ra kết quả bằng cách sử dụng hình thức luận spin của Pauli.

(Berkeley)

Lời giải:

Đối với một phương bất kì trong không gian $\mathbf{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$ toán tử spin là



Hình 3.6

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n} = \sigma_x \sin\theta\cos\varphi + \sigma_y \sin\theta\sin\varphi + \sigma_z\cos\theta$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix},$$

ở đây

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

là các ma trận Pauli. Đặt hàm riêng và trị riêng tương ứng của toán tử spin là $\binom{a}{b}$ và λ. Khi đó

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

hay

$$a(\cos\theta - \lambda) + b e^{-i\varphi} \sin\theta = 0,$$
$$a e^{i\varphi} \sin\theta - b(\lambda + \cos\theta) = 0.$$

Để a, b không triệt tiêu đồng thời,

$$\begin{vmatrix} \cos\theta - \lambda & e^{-i\varphi}\sin\theta \\ e^{i\varphi}\sin\theta & -(\lambda + \cos\theta) \end{vmatrix} = \lambda^2 - \cos^2\theta - \sin^2\theta = 0,$$

hay $\lambda^2 = 1$, tức là, $\lambda = \pm 1$, tương ứng với các mômen spin $\pm\frac{1}{2}\hbar$. Ngoài ra, điều kiện chuẩn hóa yêu cầu

$$(a^* \; b^*) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

Đối với $\lambda = +1$, ta có

$$\frac{b}{a} = \frac{1 - \cos\theta}{e^{-i\varphi}\sin\theta} = \frac{\sin\frac{\theta}{2}}{\cos\frac{\theta}{2}} e^{i\varphi},$$

và với điều kiện chuẩn hóa, vectơ riêng

$$|\uparrow n\rangle = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi}\sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Đối với $\lambda = -1$, ta có

$$\frac{b}{a} = -\frac{\cos\theta + 1}{e^{-i\varphi}\sin\theta} = -\frac{\cos\frac{\theta}{2}}{e^{-i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}}$$

và với điều kiện chuẩn hóa, vectơ riêng

$$|\downarrow n\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ \cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Đối với máy Stern-Gerlach thứ nhất chọn hướng của từ trường theo phương z. Chọn n theo phương của từ trường trong máy Stern-Gerlach thứ hai. Như vậy, trong biểu thức trên $\varphi = 0$, $\theta = \alpha$.

Nếu các hạt được đưa tới máy $S-G$ thứ hai có spin thuận, ta có

$$|\uparrow z\rangle = c|\uparrow n\rangle + d|\downarrow n\rangle,$$

$$c = \langle\uparrow n|\uparrow z\rangle = (\cos(\alpha/2), \sin(\alpha/2))\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \cos(\alpha/2),$$

$$d = \langle\downarrow n|\uparrow z\rangle = (-\sin(\alpha/2), \cos(\alpha/2))\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = -\sin(\alpha/2).$$

Bởi vậy, sau khi chúng rời máy $S-G$ thứ hai tỉ số của các số hạt của hai chùm là

$$\frac{|c|^2}{|d|^2} = \frac{\cos^2(\alpha/2)}{\sin^2(\alpha/2)} = \cot^2\frac{\alpha}{2}.$$

Nếu các hạt đi vào máy $S-G$ thứ hai có spin nghịch, ta có

$$|\downarrow z\rangle = c|\uparrow n\rangle + d|\downarrow n\rangle,$$

$$c = \langle\uparrow n|\downarrow z\rangle = (\cos(\alpha/2), \sin(\alpha/2))\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \sin(\alpha/2),$$

$$d = \langle\downarrow n|\downarrow z\rangle = (-\sin(\alpha/2), \cos(\alpha/2))\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \cos(\alpha/2),$$

và tỉ số của hai chùm hạt là

$$\frac{\sin^2(\alpha/2)}{\cos^2(\alpha/2)} = \tan^2\frac{\alpha}{2}.$$

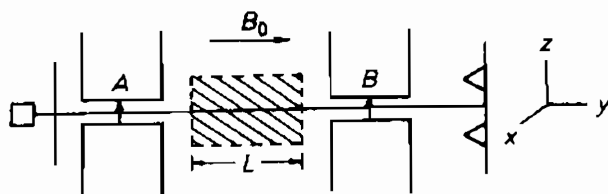
3040

Mômen từ của một nguyên tử bạc về cơ bản là bằng mômen từ của electron hóa trị chưa kết cặp và bằng $\boldsymbol{\mu} = -\gamma\mathbf{s}$, ở đây $\gamma = e/mc$ và s là spin electron.

Giả thiết rằng một chùm các phân tử bạc có vận tốc V được cho qua một máy Stern-Gerlach có gradien từ trường theo phương z, và giả thiết chỉ có chùm với $m_s = \hbar/2$ được xem xét như sau. Chùm này đi vào một vùng dài L có một từ trường không đổi B_0 hướng dọc theo trục của chùm (trục y). Sau đó nó đi vào một máy Stern-Gerlach tương tự như máy thứ nhất như chỉ ra trên Hình 3.7. Hãy mô tả rõ ràng hiện tượng sẽ quan sát thấy khi chùm hạt đi ra khỏi máy Stern-Ferrlach thứ hai. Biểu diễn cường độ của các chùm đi ra theo các tham số V, L, B_0 và các hằng số của bài toán.

Sử dụng các phương trình chuyển động cơ học lượng tử để rút ra kết quả của bạn.

(*Berkeley*)



Hình 3.7

Lời giải:

Nếu ta nhìn từ lối ra của máy $S - G$ thứ hai, ta sẽ thấy hai vạch đen xuất hiện do sự lắng đọng của hai loại nguyên tử bạc với $m_s = \hbar/2$ và $m_s = -\hbar/2$.

Kí hiệu trạng thái của hệ trong vùng L bằng $|t\rangle$. Nếu ta chỉ xét các nguyên tử với $m_s = \hbar/2$ trong chùm đi vào vùng L tại $t = 0$, thì

$$|t = 0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Hamiltonian của hệ trong vùng có chiều dài L là

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{\gamma \hbar B_0}{2} \sigma_y ,$$

và như thế

$$\begin{aligned} |t\rangle &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) |t = 0\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{i\gamma B_0 t}{2} \sigma_y\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$= \left(\cos\frac{\gamma B_0 t}{2} - i\sigma_y \sin\frac{\gamma B_0 t}{2}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$= \cos\frac{\gamma B_0 t}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \sin\frac{\gamma B_0 t}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Như vậy, tại lối ra của vùng, cường độ của các chùm hạt với $m_s = \frac{\hbar}{2}$ và $m_s = -\frac{\hbar}{2}$ tương ứng là

$$I_+ = I_0\cos^2\left(\frac{\gamma B_0 t}{2}\right), \quad I_- = I_0\sin^2\left(\frac{\gamma B_0 t}{2}\right),$$

ở đây I_0 là cường độ của chùm hạt đi vào vùng từ trường.

Khi chùm rời khỏi vùng L, $t = L/V$. Như vậy, tỉ số của các cường độ là

$$\cot^2(\gamma B_0 L/2V).$$

Sự tách chùm được thấy khi nó thoát ra khỏi máy Stern-Gerlach thứ hai.

3041

Hai hạt spin 1/2 có điện tích trái dấu (spin $\mathbf{s}_1$ và $\mathbf{s}_2$) liên kết với nhau trong một hệ với năng lượng tương tác ΔE.

Hệ được đặt trong một từ trường đều $\mathbf{H} = H\hat{\mathbf{z}}$. Hamiltonian của tương tác spin là

$$\hat{H} = (\Delta E/4)(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) - (\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2) \cdot \mathbf{H}$$

ở đây $\boldsymbol{\mu}_i = g_i\mu_0\mathbf{s}_i$ là mômen từ của hạt thứ i.

Các hàm sóng spin của bốn trạng thái của hệ, dưới dạng các trạng thái riêng của thành phần z của các toán tử $\boldsymbol{\sigma}_i = 2\mathbf{s}_i$, là

$$\psi_1 = \alpha_1\alpha_2, \quad \psi_2 = s\beta_1\alpha_2 + c\alpha_1\beta_2, \quad \psi_3 = c\beta_1\alpha_2 - s\alpha_1\beta_2, \quad \psi_4 = \beta_1\beta_2,$$

ở đây

$$(\sigma_z)_i\alpha_i = \alpha_i, \quad (\sigma_z)_i\beta_i = -\beta_i, \quad s = (1/\sqrt{2})\cdot(1 - x/\sqrt{1+x^2})^{1/2},$$

$$c = (1/\sqrt{2})(1 + x/\sqrt{1+x^2})^{1/2},$$
$$x = \mu_0 H(g_2 - g_1)/\Delta E.$$

(a) Hãy tìm các trị riêng năng lượng liên hệ với từng trạng thái ψ_i. Hãy thảo luận trong các trường hợp giới hạn $\mu_0 H/\Delta E \gg 1$ và $\mu_0 H/\Delta E \ll 1$.

(b) Giả thiết rằng một trạng thái ban đầu $\psi(0)$ được sắp đặt sao cho hạt 1 phân cực theo phương từ trường z, nhưng hạt 2 thì không bị phân cực. Hãy tìm sự phụ thuộc vào thời gian của độ phân cực của hạt 1

$$P_{1z}(t) = \langle\psi(t)\,|\,\sigma_{1z}\,|\,\psi(t)\rangle\,.$$

Thảo luận các trường hợp giới hạn $\mu_0 H/\Delta E \ll 1$ và $\mu_0 H/\Delta E \gg 1$.

(*Columbia*)

Lời giải:

(a) $\boldsymbol{\sigma}$, α, β có thể được biểu diễn dưới dạng các ma trận

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

thỏa mãn các hệ thức sau

$$\begin{aligned} \sigma_{ix}\alpha_i &= \beta_i, & \sigma_{ix}\beta_i &= \alpha_i\,, \\ \sigma_{iy}\alpha_i &= i\beta_i, & \sigma_{iy}\beta_i &= -i\alpha_i\,, \\ \sigma_{iz}\alpha_i &= \alpha_i, & \sigma_{iz}\beta_i &= -\beta_i\,. \end{aligned}$$

Khi đó, vì

$$\begin{aligned} \hat{H} &= (\Delta E/4)(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) - (\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2)\cdot \mathbf{H} \\ &= (\Delta E/4)(\sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1z}\sigma_{2z}) \\ &\quad - \frac{1}{2}\mu_0 H(g_1\sigma_{1z} + g_2\sigma_{2z})\,, \end{aligned}$$

ở đây ta đã sử dụng mối liên hệ $\boldsymbol{\mu} = g\mu_0\mathbf{s} = \frac{1}{2}g\mu_0\boldsymbol{\sigma}$, ta có

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_1 = \hat{H}\alpha_1\alpha_2 &= (\Delta E/4)(\beta_1\beta_2 - \beta_1\beta_2 + \alpha_1\alpha_2) - \frac{1}{2}\mu_0 H(g_1 + g_2)\,\alpha_1\alpha_2 \\ &= \left(\Delta E/4 - \frac{g_1 + g_2}{2}\,\mu_0 H\right)\alpha_1\alpha_2 = \left(\Delta E/4 - \frac{g_1+g_2}{2}\cdot\mu_0 H\right)\psi_1\,, \end{aligned}$$

và do vậy

$$E_1 = \Delta E/4 - \frac{1}{2}(g_1 + g_2)\mu_0 H .$$

Tương tự,

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_2 &= \frac{\Delta E}{4}\left[s(\alpha_1\beta_2 + \alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2) + c(\beta_1\alpha_2 + \beta_1\alpha_2 - \alpha_1\beta_2)\right] \\ &\quad + \frac{1}{2}(g_1 - g_2)\mu_0 H(s\beta_1\alpha_2 - c\alpha_1\beta_2) \\ &= [(\Delta E/4)(2c - s) - (\Delta E/2)xs]\,\beta_1\alpha_2 \\ &\quad + [(\Delta E/4)(2s - c) + (\Delta E/2)xc]\,\alpha_1\beta_2 \\ &= (\Delta E/4)(2c/s - 2x - 1)\,s\beta_1\alpha_2 + (\Delta E/4)(2s/c + 2x - 1)c\alpha_1\beta_2 .\end{aligned}$$

Khi đó, do

$$\begin{aligned}2c/s - 2x &= 2\,\frac{(1 + x/\sqrt{1+x^2})^{1/2}}{(1 - x/\sqrt{1+x^2})^{1/2}} - 2x = 2\sqrt{1+x^2} \\ &= 2(\sqrt{1+x^2} - x) + 2x = 2s/c + 2x ,\end{aligned}$$

ta có

$$\hat{H}\psi_2 = (\Delta E/4)(2\sqrt{1+x^2} - 1)\,\psi_2 ,$$

hay

$$E_2 = (\Delta E/4)(2\sqrt{1+x^2} - 1) .$$

Bằng cùng một cách thức như trên ta thu được

$$E_3 = (-\Delta E/4)(2\sqrt{1+x^2} + 1) ,$$

$$E_4 = (\Delta E/4) + \frac{g_1 + g_2}{2}\mu_0 H .$$

(b) Do hạt 2 không bị phân cực và có thể được coi như là một trạng thái hỗn hợp nên trạng thái ξ_2 của nó có thể được khai triển dưới dạng α_2 và β_2

$$\xi_2 = a\alpha_2 + b\beta_2 ,$$

ở đây $|a|^2 = |b|^2 = 1/2$. Khi đó, hàm sóng toàn phần ban đầu là

$$\begin{aligned}\psi(0) &= \alpha_1\xi_2 = \alpha_1(a\alpha_2 + b\beta_2) \\ &= a\psi_1 + b\,\frac{c}{c^2 + s^2}\,\psi_2 - b\,\frac{s}{c^2 + s^2}\,\psi_3 \\ &= a\psi_1 + bc\psi_2 - bs\psi_3 ,\end{aligned}$$

vì

$$c^2 + s^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{x}{\sqrt{1+x^2}}\right) + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{x}{\sqrt{1+x^2}}\right) = 1 .$$

Suy ra

$$\psi(t) = a\psi_1 \exp\left(-i\,\frac{E_1}{\hbar}\,t\right) + bc\psi_2 \exp\left(-i\,\frac{E_2}{\hbar}\,t\right)$$
$$- bs\psi_3 \exp\left(-i\,\frac{E_3}{\hbar}\,t\right) .$$

Sau đó, sử dụng các hệ thức

$$\sigma_{1z}\psi_1 = \sigma_{1z}\alpha_1\alpha_2 = \alpha_1\alpha_2 ,$$
$$\sigma_{1z}\psi_2 = \sigma_{1z}(s\beta_1\alpha_2 + c\alpha_1\beta_2) = -s\beta_1\alpha_2 + c\alpha_1\beta_2 ,$$
$$\sigma_{1z}\psi_3 = \sigma_{1z}(c\beta_1\alpha_2 - s\alpha_1\beta_2) = -(c\beta_1\alpha_2 + s\alpha_1\beta_2) ,$$

ta thu được

$$\begin{aligned}
P_{1z}(t) &= \langle\psi(t)\,|\,\sigma_{1z}\,|\,\psi(t)\rangle \\
&= |\,a\,|^2 + |\,b\,|^2\,\langle \exp(-iE_2t/\hbar)\,c(s\beta_1\alpha_2 + c\alpha_1\beta_2) \\
&\quad - \exp(-iE_3t/\hbar)\,s(c\beta_1\alpha_2 - s\alpha_1\beta_2)\,|\,|\,\exp(-iE_2t/\hbar) \\
&\quad \times c(-s\beta_1\alpha_2 + c\alpha_1\beta_2) + \exp(-iE_3/\hbar)\,s(c\beta_1\alpha_2 + s\alpha_1\beta_2)\rangle \\
&= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\,[(s^2 - c^2)^2 + 4s^2c^2\cos(E_2 - E_3)t/\hbar] \\
&= \frac{1}{2} + \frac{1}{2(1+x^2)}\,[x^2 + \cos(\sqrt{1+x^2}\,\Delta E t/\hbar)] \\
&= 1 - \frac{1}{1+x^2}\,\sin^2(\sqrt{1+x^2}\,\Delta E t/2\hbar) .
\end{aligned}$$

(c) Trong giới hạn $\mu_0 H/\Delta E \gg 1$, tức là, $x \gg 1$, ta có

$$E_1 = \frac{\Delta E}{4} - \frac{g_1 + g_2}{2}\,\mu_0 H \approx -\frac{1}{2}\,(g_1 + g_2)\,\mu_0 H ,$$
$$E_2 = \frac{\Delta E}{4}\,(2\sqrt{1+x^2} - 1) \approx (\Delta E/4) \times 2x = \frac{1}{2}\,(g_2 - g_1)\,\mu_0 H ,$$
$$E_3 = -\frac{\Delta E}{4}\,(1 + 2\sqrt{1+x^2}) \approx -\frac{1}{2}\,(g_2 - g_1)\,\mu_0 H ,$$

$$E_4 = \frac{\Delta E}{4} + \frac{g_1 + g_2}{2}\,\mu_0 H \approx \frac{1}{2}\,(g_1 + g_2)\,\mu_0 H\,,$$

$$P_{1z}(t) \approx 1\,.$$

Khi $\mu_0 H/\Delta E \ll 1$, tức là, $x \ll 1$, ta có

$$E_1 \approx E_4 \approx \Delta E/4\,,$$

$$E_2 = \frac{\Delta E}{4}\,(2\sqrt{1+x^2} - 1) \approx \frac{\Delta E}{4}\,,$$

$$E_3 \approx -\frac{3\Delta E}{4}\,,$$

$$P_{1z}(t) \approx 1 - \sin^2(\Delta E t/2\hbar)\,.$$

3042

Một nguyên tử hydro ở trạng thái $^2P_{1/2}$ với mômen xung lượng toàn phần hướng lên theo trục z. Trong tất cả các phần của bài tập này hãy chỉ ra các tính toán của bạn và giải thích cặn kẽ.

(a) Với xác suất bằng bao nhiêu thì electron có trạng thái spin hướng xuống?

(b) Hãy tính xác suất trên một đơn vị góc khối $P(\theta, \varphi)$ để tìm thấy electron tại các góc cầu θ, φ (không phụ thuộc vào khoảng cách bán kính và spin).

(c) Một người làm thí nghiệm tác dụng một từ trường yếu theo chiều dương của trục z. Mômen từ hiệu dụng của nguyên tử trong từ trường này là bao nhiêu?

(d) Bắt đầu từ trạng thái gốc, người làm thí nghiệm tăng dần từ trường lên đến trên giới hạn tách mức siêu tinh tế. Các số lượng tử spin và quỹ đạo của trạng thái cuối cùng sẽ là bao nhiêu?

[Giả thiết Hamiltonian là tuyến tính theo từ trường.]

(e) Mômen từ hiệu dụng của trạng thái cuối cùng này là bao nhiêu?

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Đối với trạng thái $^2P_{1/2}$, $l = 1$, $s = 1/2$, $J = 1/2$, $J_z = 1/2$. Biến đổi

biểu diễn liên kết thành biểu diễn không liên kết, ta có

$$|J,\ J_z\rangle = |1/2,\ 1/2\rangle = \sqrt{2/3}\,|1,\ 1\rangle\,|1/2,\ -1/2\rangle$$
$$-\sqrt{1/3}\,|1,\ 0\rangle\,|1/2,\ 1/2\rangle\,.$$

Do đó $P_1 = 2/3$.

(b) Do

$$|J,\ J_z\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\begin{pmatrix}\sqrt{2}\,Y_{11}\\ Y_{10}\end{pmatrix},$$

ta có

$$P(\theta,\ \varphi)\,d\Omega = \frac{1}{3}\left(2Y_{11}^{*}Y_{11} + Y_{10}^{*}Y_{10}\right)d\Omega\,.$$

Như vậy, xác suất trên một đơn vị góc khối là

$$P(\theta,\ \varphi) = \frac{1}{3}\left(2\times\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta + \frac{3}{4\pi}\cos^2\theta\right) = \frac{1}{4\pi}\,.$$

(c) Trong từ trường yếu, J và J_z là các số lượng tử tốt và trạng thái giữ không đổi. Mômen từ hiệu dụng là

$$\mu = \left\langle\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\middle|\mu_z\middle|\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right\rangle = g\,\frac{e}{2mc}\left\langle\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\middle|J_z\middle|\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right\rangle = g\cdot\frac{e\hbar}{4mc},$$

ở đây m là khối lượng electron và

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2J(J+1)} = \frac{2}{3}\,.$$

Do vậy $\mu = e\hbar/6mc$.

(d) Trong một từ trường mạnh, tương tác của mômen từ với từ trường là mạnh hơn rất nhiều so với tương tác liên kết spin và quỹ đạo, do đó tương tác spin-quỹ đạo có thể được bỏ qua. Ở đây l và s là các số lượng tử tốt. Hamiltonian liên hệ với từ trường là

$$W = -\boldsymbol{\mu}_l\cdot\mathbf{B} - \boldsymbol{\mu}_s\cdot\mathbf{B} = eB\hat{l}_z/2mc + eB\hat{s}_z/mc\,.$$

Khi từ trường được tăng lên dần dần từ không, trạng thái giữ ở năng lượng thấp nhất. Từ biểu thức của W, ta thấy rằng khi từ trường trở nên mạnh, chỉ khi $l_z = -\hbar$, $s_z = -\hbar/2$ thì trạng thái mới giữ ở mức năng lượng cực tiểu. Như

vậy, các số lượng tử của trạng thái cuối cùng là $l = 1$, $l_z = -1$, $s = 1/2$, $s_z = -1/2$.

(e) Mômen từ hiệu dụng của trạng thái cuối cùng là

$$\mu = \overline{\mu}_{lz} + \overline{\mu}_{sz} = -e\hbar/2mc - e\hbar/2mc = -e\hbar/mc\,.$$

3043

Xét một hạt trung hoà có mômen xung lượng riêng $\sqrt{s(s+1)}$, ở đây $s = \hbar/2$, tức là hạt có spin.

Giả thiết rằng hạt có một mômen từ $\mathbf{M} = \gamma \mathbf{s}$, ở đây γ là hằng số. Trạng thái cơ học lượng tử của hạt có thể được mô tả trong không gian spin với hai vectơ cơ sở $|+\rangle$ và $|-\rangle$ biểu diễn cho các định hướng song song và phản song song với trục z

$$\hat{s}_z\,|+\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|+\rangle, \quad \hat{s}_z\,|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}\,|-\rangle\,.$$

Tại thời điểm $t = 0$ trạng thái của hệ là $|\psi(t=0)\rangle = |+\rangle$. Hạt chuyển động theo trục y qua một từ trường đều $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{y}}$ hướng theo trục y.

(a) Dựa trên hệ cơ sở $|+\rangle$, $|-\rangle$ hãy viết biểu thức cho $|\psi(t)\rangle$?

(b) Tính các giá trị kì vọng của các đại lượng s_x, s_y, s_z quan sát được bằng thực nghiệm như hàm số của thời gian?

(*CUS*)

Lời giải:

(a) Hamiltonian của hạt là

$$\hat{H} = -\mathbf{M}\cdot\mathbf{B} = -\gamma\hat{s}_y B\,.$$

Trong biểu diễn của $\hat{\mathbf{s}}^2$, $\hat{s}_z$,

$$\hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

và như vậy hai trạng thái riêng của $\hat{s}_y$ là

$$|\,s_y = \hbar/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\,s_y = -\hbar/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Do

$$\hat{H}\left|s_y = \frac{1}{2}\hbar\right\rangle = -\gamma B\,\frac{1}{2}\hbar\left|s_y = \frac{1}{2}\hbar\right\rangle,$$

$$\hat{H}\left|s_y = -\frac{1}{2}\hbar\right\rangle = \gamma B\,\frac{1}{2}\hbar\left|s_y = -\frac{1}{2}\hbar\right\rangle,$$

trạng thái bất kì của hạt có thể được biểu diễn như sau

$$|\psi(t)\rangle = c_1\left|s_y = \frac{1}{2}\hbar\right\rangle \exp\left(+i\,\frac{1}{2}\gamma Bt\right) + c_2\left|s_y = -\frac{1}{2}\hbar\right\rangle \exp\left(-i\,\frac{1}{2}\gamma Bt\right).$$

Điều kiện ban đầu

$$|\psi(t=0)\rangle = |s_z = \hbar/2\rangle$$

dẫn đến

$$\left|s_z = \frac{1}{2}\hbar\right\rangle = c_1\left|s_y = \frac{1}{2}\hbar\right\rangle + c_2\left|s_y = -\frac{1}{2}\hbar\right\rangle,$$

suy ra

$$c_1 = \left\langle \frac{1}{2}\hbar = s_y \middle| s_z = \frac{1}{2}\hbar\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-i\\1\end{pmatrix}^+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(i\ 1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,i,$$

$$c_2 = \left\langle -\frac{1}{2}\hbar = s_y \middle| s_z = \frac{1}{2}\hbar\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\1\end{pmatrix}^+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(-i\ 1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\,i.$$

Do đó

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,i\,\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-i\\1\end{pmatrix}\exp\left(i\,\frac{1}{2}\gamma Bt\right) - \frac{1}{\sqrt{2}}\,i\,\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\1\end{pmatrix}\exp\left(-i\,\frac{1}{2}\gamma Bt\right)$$
$$= \cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\left|s_z = \frac{1}{2}\hbar\right\rangle - \sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\left|s_z = -\frac{1}{2}\hbar\right\rangle.$$

(b)

$$\langle s_z \rangle = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) & -\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) \end{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) \\ -\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) & \sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) \\ -\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar \cos(\gamma Bt)\,.$$

$\langle s_y \rangle = 0$, bởi vì $\langle s_y \rangle = 0$ tại $t = 0$ và s_y được bảo toàn.

$$\langle s_x \rangle = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) & -\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) \end{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) \\ -\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) & \cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) \end{pmatrix}$$

$$\times \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) \\ -\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right) \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\hbar \sin(\gamma Bt)\,.$$

3044

Một hạt có spin 1/2 và mômen từ μ được đặt trong một từ trường

$$\mathbf{B} = B_0\,\hat{\mathbf{z}} + B_1 \cos\omega t\,\hat{\mathbf{x}} - B_1 \sin\omega t\,\hat{\mathbf{y}}\,,$$

thường được sử dụng trong các thí nghiệm cộng hưởng từ.

Giả thiết hạt có spin thuận theo trục $+z$ tại $t = 0 (m_s = +1/2)$. Hãy suy ra xác suất để tìm thấy hạt có spin nghịch $(m_s = -1/2)$ tại $t > 0$.

(Berkeley)

Lời giải:

Hamiltonian của hệ là

$$H = -\mu\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} .$$

Đặt

$$\omega_0 = \mu B_0/\hbar, \quad \omega_1 = \mu B_1/\hbar ,$$

ta có

$$\begin{aligned} H &= -\mu(B_0\sigma_z + B_1\sigma_x \cos\omega t - B_1\sigma_y \sin\omega t) \\ &= -\hbar\omega_0\sigma_z - \hbar\omega_1 \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} , \end{aligned}$$

ở đây

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \ \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \ \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Đặt hàm sóng của hệ là

$$|t\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} .$$

Phương trình Schrödinger $i\hbar\partial_t |t\rangle = H |t\rangle$, hay

$$i \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} = -\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} - \omega_1 \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} ,$$

dẫn đến

$$\begin{cases} \dot{a} = i\omega_0 a + i\omega_1 e^{i\omega t} b , \\ \dot{b} = -i\omega_0 b + i\omega_1 e^{-i\omega t} a . \end{cases}$$

Thử một nghiệm có dạng

$$\begin{cases} a = \alpha \exp(i\omega_0 t) , \\ b = \beta \exp(-i\omega_0 t) . \end{cases}$$

Thế vào phương trình trên dẫn đến

$$\begin{cases} \dot{\alpha} = i\omega_1 \exp\left[i(-2\omega_0 + \omega)t\right] \beta\,, \\ \dot{\beta} = i\omega_1 \exp\left[-i(-2\omega_0 + \omega)t\right] \alpha\,. \end{cases}$$

Giả thiết rằng α và β có dạng

$$\begin{cases} \alpha = A_1 \exp\left[i(-2\omega_0 + \omega + \Omega)t\right], \\ \beta = A_2\, e^{i\Omega t}\,, \end{cases}$$

ở đây A_1, A_2, và Ω là các hằng số. Thay vào, ta được

$$\begin{cases} (-2\omega_0 + \omega + \Omega)\, A_1 - \omega_1 A_2 = 0\,, \\ -\omega_1 A_1 + \Omega A_2 = 0\,. \end{cases}$$

Với hệ phương trình này để không có nghiệm tầm thường thì định thức của các hệ số A_1, A_2 phải bằng không, tức là,

$$(-2\omega_0 + \omega + \Omega)\,\Omega - \omega_1^2 = 0\,,$$

suy ra

$$\Omega_\pm = -\left(-\omega_0 + \frac{\omega}{2}\right) \pm \sqrt{(-\omega_0 + \omega/2)^2 + \omega_1^2}\,.$$

Do đó, dạng tổng quát của β là

$$\beta = A_{2+} \exp(i\Omega_+ t) + A_{2-} \exp(i\Omega_- t)\,,$$

và dạng của α là

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\dot{\beta} \exp\left[i(-2\omega_0 + \omega)\, t\right]}{i\omega_1} \\ &= \frac{1}{\omega_1} \exp\ \left[i(-2\omega_0 + \omega)\, t\right] \left[\Omega_+ A_{2+} \exp(i\Omega_+ t)\right. \\ &\quad \left. + \Omega_- A_{2-} \exp(i\Omega_- t)\right]. \end{aligned}$$

Ban đầu spin hướng lên theo trục z, như vậy

$$|t = 0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha(0) \\ \beta(0) \end{pmatrix}\,.$$

dẫn đến

$$\frac{1}{\omega_1}(\Omega_+ A_{2+} + \Omega_- A_{2-}) = 1,$$

$$A_{2+} + A_{2-} = 0.$$

Nghiệm là

$$\begin{aligned} A_{2+} = -A_{2-} &= \omega_1/(\Omega_+ - \Omega_-) \\ &= \frac{\omega_1}{2\sqrt{(\omega_0 - \omega/2)^2 + \omega_1^2}}. \end{aligned}$$

Do đó

$$\begin{aligned} b(t) &= \exp(-i\omega_0 t)\,\beta(t) \\ &= \exp(-i\omega_0 t) A_{2+} \\ &\quad \times [\exp(i\Omega_+ t) - \exp(i\Omega_- t)] \\ &= \exp(-i\omega t/2) 2i A_{2+} \\ &\quad \times \sin(\sqrt{(\omega_0 - \omega/2)^2 + \omega_1^2}\, t) \\ &= \frac{i\omega_1 \exp[-i(\omega/2)t]}{\sqrt{(\omega_0 - \omega/2)^2 + \omega_1^2}} \\ &\quad \times \sin(\sqrt{(\omega_0 - \omega/2)^2 + \omega_1^2}\, t). \end{aligned}$$

Xác suất để hạt có spin ngược theo trục z tại thời điểm t là

$$\begin{aligned} P &= |\langle z \downarrow |t\rangle|^2 \\ &= |b(t)|^2 = \frac{\omega_1^2 \sin^2(\sqrt{\omega_0 - \omega/2)^2 + \omega_1^2}\, t)}{(\omega_0 - \omega/2)^2 + \omega_1^2}. \end{aligned}$$

3045

Một hệ spin 1/2 với mômen từ $\boldsymbol{\mu} = \mu_0 \boldsymbol{\sigma}$ được đặt trong một từ trường đều không đổi theo thời gian B_0 theo chiều dương của trục z. Trong khoảng thời gian $0 < t < T$ một từ trường không phụ thuộc thời gian B_1 được tác dụng theo chiều x dương. Trong khoảng thời gian này, hệ lại được đặt trong một từ

trường đều không đổi nhưng có độ lớn khác và phương z' khác với phương của từ trường ban đầu. Trước cho đến thời điểm $t = 0$, hệ ở trạng thái $m = 1/2$ đối với trục z.

(a) Tại $t = 0$, biên độ xác suất tìm thấy hạt với các hình chiếu spin $m' = \pm 1/2$ đối với trục z' là bao nhiêu?

(b) Xác định sự tiến triển theo thời gian của các trạng thái riêng năng lượng theo trục z' trong khoảng thời gian $0 < t < T$?

(c) Biên độ xác suất tại $t = T$ để quan sát thấy hệ có trạng thái spin $m = -1/2$ đối với trục z ban đầu là bao nhiêu?

[Biểu diễn các đáp số theo góc θ giữa hai trục z và z' và tần số $\omega_0 = \mu_0 B_0/\hbar$.]

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Trong biểu diễn của s_z, các vectơ riêng của $s_{z'}$ là

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix},$$

tương ứng với các trị riêng $s_{z'} = 1/2$ và $-1/2$. Do vậy, biên độ xác suất để $m' = \pm 1/2$ tương ứng là

$$C_+ = \left(\cos\frac{\theta}{2} \quad \sin\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \cos\frac{\theta}{2},$$

$$C_- = \left(-\sin\frac{\theta}{2} \quad \cos\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\sin\frac{\theta}{2}.$$

(b) Hamiltonian trong khoảng $0 < t < T$ là

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} = -\mu_0\left(B_0\sigma_z + B_1\sigma_x\right)$$
$$= -\mu_0\begin{pmatrix} B_0 & B_1 \\ B_1 & -B_0 \end{pmatrix}.$$

Các hàm riêng ban đầu là

$$\chi_+(0) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad \chi_-(0) = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix},$$

ở đây

$$\theta = \tan^{-1}\left(\frac{B_1}{B_0}\right).$$

Thế vào phương trình Schrödinger $H\chi_\pm(0) = \pm E\chi_\pm(0)$ dẫn đến

$$E = -\mu_0 B_0/\cos\theta = -\mu_0 B\,,$$

ở đây

$$B = \sqrt{B_0^2 + B_1^2}\,.$$

Tại thời điểm sau của t trong khoảng $0 < t < T$, các trạng thái riêng là

$$\chi_\pm(t) = \exp(\mp iEt/\hbar)\,\chi_\pm(0) = \exp(\pm i\mu_0 Bt/\hbar)\,\chi_\pm(0)\,.$$

(c) Biên độ xác suất tại $t = T$ là

$$\begin{aligned} C_-(T) &= (0\ \ 1)\exp(-iHT/\hbar)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \\ &= (iB_1/\sqrt{B_0^2+B_1^2})\sin(\mu_0 T\sqrt{B_0^2+B_1^2}/\hbar) \\ &= i\sin\theta\sin(\mu_0 BT/\hbar)\,. \end{aligned}$$

Một cách khác là sử dụng

$$\psi(0) = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \cos\frac{\theta}{2}\,\chi_+(0) - \sin\frac{\theta}{2}\,\chi_-(0)\,,$$

và do đó

$$\begin{aligned} \psi(t) = \chi_+(0)\cos\frac{\theta}{2}\exp(i\mu_0 Bt/\hbar) \\ - \chi_-(0)\sin\frac{\theta}{2}\exp(-i\mu_0 Bt/\hbar)\,, \end{aligned}$$

để thu được

$$\begin{aligned} C_-(T) &= \beta^+\psi(T) = \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} \\ &\quad\times\{\exp(i\mu_0 BT/\hbar) - \exp(-i\mu_0 BT/\hbar)\}\,, \\ &= i\sin\theta\sin\frac{\mu_0 BT}{\hbar}\,, \quad \text{ở đây } \beta = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}. \end{aligned}$$

3046

Một hệ có spin 1/2 và mômen từ μ được đặt trong một từ trường không đổi $H_0\mathbf{e}_z$ trong đó năng lượng của trạng thái spin $|+1/2\rangle$ là $\hbar\omega_0$, và năng lượng của trạng thái spin $|-1/2\rangle$ được cho bằng 0. Hệ ở trạng thái $|-1/2\rangle$ khi tại $t=0$, một từ trường $H(\mathbf{e}_x\cos\omega_0 t + \mathbf{e}_y \sin\omega_0 t)$ đột nhiên được bật lên. Bỏ qua quá trình hồi phục, hãy tìm năng lượng của hệ spin như một hàm của ω_0, H, c và t, ở đây

$$c = \langle +1/2 | \mu_x + i\mu_y | -1/2\rangle .$$

Tại sao năng lượng của hệ spin không được bảo toàn?

(*Columbia*)

Lời giải:

Hamiltonian là

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\boldsymbol{\mu}\cdot(\mathbf{H}+\mathbf{H}_0) = -\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{H}+\mathbf{H}_0)\\ &= -\mu(H\sigma_x\cos\omega_0 t + H\sigma_y \sin\omega_0 t + H_0\sigma_z)\\ &= -\mu\begin{pmatrix} H_0 & H\exp(-i\omega_0 t)\\ H\exp(i\omega_0 t) & -H_0\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Trong phương trình Schrödinger

$$i\hbar\,\partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi ,$$

đặt

$$\psi = \begin{pmatrix} a(t)\\ b(t)\end{pmatrix},$$

ta được

$$\begin{cases}\dfrac{da}{dt} = \dfrac{\mu i}{\hbar}\left[H_0 a + H\exp(-i\omega_0 t)\, b\right],\\[2mm] \dfrac{db}{dt} = \dfrac{\mu i}{\hbar}\left[H\exp(i\omega_0 t)\, a - H_0 b\right].\end{cases}$$

Thử một nghiệm có dạng

$$a = A\exp\left[-i\left(\Omega + \frac{1}{2}\,\omega_0\right)t\right],$$

$$b = B\exp\left[-i\left(\Omega - \frac{1}{2}\,\omega_0\right)t\right],$$

ở đây A, B và Ω là các hằng số. Thế dẫn đến

$$\begin{cases} \left(\Omega + \frac{1}{2}\,\omega_0 + \omega\right) A + \omega' B = 0\,, \\ \left(\Omega - \frac{1}{2}\,\omega_0 - \omega\right) B + \omega' A = 0\,, \end{cases}$$

ở đây

$$\omega = \frac{\mu H_0}{\hbar}\,,$$
$$\omega' = \frac{\mu H}{\hbar}\,.$$

Để có nghiệm không tầm thường ta cần

$$\begin{vmatrix} \Omega + \left(\frac{1}{2}\,\omega_0 + \omega\right) & \omega' \\ \omega' & \Omega - \left(\frac{1}{2}\,\omega_0 + \omega\right) \end{vmatrix} = 0\,,$$

suy ra

$$\Omega = \pm\sqrt{\omega'^2 + \left(\frac{1}{2}\,\omega_0 + \omega\right)^2} = \pm Q\,,$$

ở đây $Q = |\sqrt{\omega'^2 + (\frac{1}{2}\,\omega_0 + \omega)^2}|$. Do vậy

$$\psi(t) = (A_1 e^{-iQt} + A_2 e^{iQt}) \exp\left(-i\,\frac{\omega_0}{2}\,t\right)\alpha$$
$$+ (B_1 e^{-iQt} + B_2 e^{iQt}) \exp\left(i\,\frac{\omega_0}{2}\,t\right)\beta\,,$$

ở đây

$$B_{1,2} = -A_{1,2}\,\frac{\Omega_{1,2} + \left(\omega + \frac{1}{2}\,\omega_0\right)}{\omega'}\,,$$

các chỉ số 1, 2 tương ứng với các giá trị của Ω với các dấu +, −, và

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Tại $t = 0$ hệ ở trạng thái $|-\frac{1}{2}\rangle$ và $\psi = \binom{0}{1}$. Như vậy $B_1 + B_2 = 1$, $A_1 + A_2 = 0$. Như vậy, do

$$\left(Q + \frac{1}{2}\omega_0 + \omega\right) A_1 + \omega' B_1 = 0\,,$$

$$\left(-Q + \frac{1}{2}\omega_0 + \omega\right) A_2 + \omega' B_2 = 0\,,$$

ta có

$$Q(A_1 - A_2) + \omega' = 0\,,$$

$$\left(\frac{1}{2}\omega_0 + \omega\right)(A_1 - A_2) + \omega'(B_1 - B_2) = 0\,,$$

suy ra

$$A_1 = -\frac{\omega'}{2Q}\,, \quad A_2 = \frac{\omega'}{2Q}\,,$$

$$B_1 = \frac{Q + \left(\omega + \frac{1}{2}\,\omega_0\right)}{2Q}\,,$$

$$B_2 = \frac{Q - \left(\omega + \frac{1}{2}\,\omega_0\right)}{2Q}\,.$$

Như vậy, hàm sóng của hệ là

$$\psi(t) = \frac{\omega'}{Q}\, i \sin(Qt) \exp\left(-i\,\frac{\omega_0}{2}\,t\right)\alpha + \left[\cos Qt - i\,\frac{\left(\omega + \frac{1}{2}\,\omega_0\right)}{Q}\sin Qt\right] \exp\left(i\,\frac{\omega_0}{2}\,t\right)\beta\,,$$

và năng lượng của hệ là

$$E = \langle\psi\,|\,H\,|\,\psi\rangle = -\mu\left[-H_0\cos^2 Qt + \frac{\omega'^2 H_0 - \left(\omega + \frac{1}{2}\,\omega_0\right)^2 H_0 - 2\omega' H\left(\omega + \frac{\omega_0}{2}\right)}{Q^2}\sin^2 Qt\right].$$

Chú ý rằng do

$$c = \left\langle +\frac{1}{2} \middle| \mu_x + i\mu_y \middle| -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$= \mu \left\langle +\frac{1}{2} \middle| \sigma_x + i\sigma_y \middle| -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$= \mu\,(1\ \ 0) \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 2\mu\,,$$

$$\mu = \frac{c}{2}\,.$$

Do năng lượng của hệ thay đổi theo thời gian t, nên nó không được bảo toàn. Điều này là do về phương diện spin hệ không phải là một hệ cô lập.

3047

Một chùm nơtron có vận tốc v đi từ một vùng (I) (ở đó từ trường là $\mathbf{B} = B_1\mathbf{e}_z$) tới một vùng (II) (ở đó từ trường là $\mathbf{B} = B_2\mathbf{e}_x$). Trong vùng (I) chùm hạt bị phân cực hoàn toàn theo hướng $+z$.

(a) Giả thiết rằng một hạt đã cho di chuyển từ vùng (I) đến vùng (II) tại thời điểm $t = 0$, hãy xác định hàm sóng spin của hạt với $t > 0$?

(b) Hãy xác định tỉ phần của các hạt quan sát được có spin hướng theo trục $+x$; theo trục $+y$; theo trục $+z$ như một hàm của thời gian?

(c) Trên thực tế, sự chuyển đổi giữa hai vùng (I) và (II) phải đột ngột đến mức nào để mô tả vật lý ở trên là có ý nghĩa?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Chỉ xét hàm sóng spin, phương trình Schrödinger là

$$i\hbar\,\partial\,|\,\chi\rangle/\partial t = \hat{H}\,|\,\chi\rangle\,,$$

ở đây

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} = -\mu_n B_2\sigma_x\,,$$

với $\mu_n = -1,9103\,\mu_N$ là mômen từ dị thường của nơtron, $\mu_N = e\hbar/2m_p c$ là magneton hạt nhân, m_p là khối lượng của proton. Khi đó

$$\frac{d}{dt}\,|\,\chi\rangle = \frac{i}{\hbar}\,\mu_n B_2\,\sigma_x\,|\,\chi\rangle \equiv -i\omega_2\sigma_x\,|\,\chi\rangle\,,$$

ở đây $\omega_2 = \frac{|\mu_n|B_2}{\hbar}$. Đặt $|\chi\rangle = \binom{a}{b}$. Phương trình trên dẫn đến

$$\begin{cases} \dot{a} = -i\omega_2 b, \\ \dot{b} = -i\omega_2 a. \end{cases}$$

Điều kiện ban đầu là $a(0) = 1$, $b(0) = 0$ do chùm hạt ban đầu bị phân cực theo hướng $+z$. Giải tìm a và b và sử dụng điều kiện ban đầu ta thu được với $t > 0$.

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} \cos\omega_2 t \\ -i\sin\omega_2 t \end{pmatrix}.$$

(b) Giá trị trung bình của spin ở trạng thái $|\chi\rangle$, tức là, vectơ phân cực của nơtron là

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \langle\chi|\boldsymbol{\sigma}|\chi\rangle = \langle\chi|\sigma_x\mathbf{e}_x + \sigma_y\mathbf{e}_y + \sigma_z\mathbf{e}_z|\chi\rangle \\ &= (0, -\sin 2\omega_2 t, \cos 2\omega_2 t) \end{aligned}$$

Như vậy, trong vùng (II) spin nơtron nằm trong mặt yz và tiến động quanh trục x với vận tốc góc $2\omega_2$.

(c) Để các mô tả trong các câu (a) và (b) có ý nghĩa thì thời gian chuyển đổi vị trí giữa các vùng (I) và (II) phải thỏa mãn

$$t \ll \frac{2\pi}{\omega_2} = \frac{h}{|\mu_n|B_2}.$$

Ví dụ nếu $B_2 \sim 10^3$ Gs, thì $t \ll 0,7\,\mu$s.

Nếu biết trước động năng của các nơtron tới thì ta có thể tính toán được giới hạn trên của độ rộng của vùng chuyển đổi đó.

3048

Hamiltonian đối với một nguyên tử $(\mu^+ e^-)$ ở trạng thái $n = 1$, $l = 0$ trong một từ trường ngoài **B** là

$$H = a\mathbf{s}_\mu \cdot \mathbf{s}_e + \frac{|e|}{m_e c}\mathbf{s}_e \cdot \mathbf{B} - \frac{|e|}{m_\mu c}\mathbf{s}_\mu \cdot \mathbf{B}.$$

(a) Nêu ý nghĩa vật lý của mỗi số hạng? Số hạng nào chiếm ưu thế trong tương tác với từ trường ngoài?

(b) Chọn trục z trùng với phương của **B** và sử dụng kí hiệu (F, M), ở đây $\mathbf{F} = \mathbf{s}_\mu + \mathbf{s}_e$, hãy chứng tỏ rằng $(1, +1)$ là một trạng thái riêng của H và cho biết trị riêng của nó.

(c) Một trường rf được tác dụng để tạo ra các chuyển dời tới trạng thái (0, 0). Mô tả định tính làm cách nào một quan sát quá trình phân rã $\mu^+ \to e^+\nu_e\nu_\mu$ có thể được dùng để phát hiện sự diễn ra của chuyển dời này.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Số hạng thứ nhất trong $\hat{H}$ là do tương tác từ giữa μ và e, các số hạng thứ hai và ba tương ứng chỉ các tương tác của μ và e với trường ngoài **B**. Trong số các số hạng này, số hạng $|e|\mathbf{s}_e \cdot \mathbf{B}/m_e c$ chiếm ưu thế do $m_e \approx m_\mu/200$.

(b) Do

$$\mathbf{F} = \mathbf{s}_\mu + \mathbf{s}_e$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\, a[\mathbf{F}^2 - \mathbf{s}_\mu^2 - \mathbf{s}_e^2] + \frac{eB}{m_e c}\, s_{ez} - \frac{eB}{m_\mu c}\, s_{\mu z}\,.$$

Xét trạng thái

$$(1, +1) = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_e \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_\mu .$$

Do các trị riêng của F^2, s_μ^2, s_e^2, $s_{\mu z}$, s_{ez} tương ứng là $1(1+1)\hbar^2$, $\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2$, $\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2$, $\frac{1}{2}\hbar$, $\frac{1}{2}\hbar$, ta có

$$\hat{H}(1, +1) = \left\{\frac{1}{2}\, a\hbar^2 \left[2 - 2 \cdot \frac{3}{4}\right] + \frac{e\hbar}{2m_e c}\, B - \frac{e\hbar}{2m_\mu c}\, B\right\}(1, +1)$$

$$= \left(\frac{1}{4}\, a\hbar^2 + \frac{e\hbar}{2m_e c}\, B - \frac{e\hbar}{2m_\mu c}\, B\right)(1, +1)\,.$$

Như vậy $(1, +1)$ là một trạng thái riêng của $\hat{H}$, với trị riêng

$$a\hbar^2/4 + e\hbar B/2m_e c - e\hbar B/2m_\mu c\,.$$

(c) Sự phân rã $\mu^+ \to e^+\nu_e\nu_\mu$ có thể phát hiện được qua quan sát quá trình phân hủy của "nguyên tử" positroni $e^+e^- \to 2\gamma$. Đối với trạng thái $(1, +1)$, mômen xung lượng toàn phần của hệ e^+e^- là 1, và do vậy e^+e^- không thể phân rã thành 2γ có mômen xung lượng toàn phần bằng 0. Đối với trạng thái (0, 0), mômen xung lượng toàn phần của hệ e^+e^- là 0 và do vậy nó có thể

phân rã thành 2γ. Như vậy, sự phát hiện ra quá trình $e^+e^- \to 2\gamma$ hàm ý sự phân rã $\mu^+ \to e^+\nu_e\nu_\mu$ của hệ (μ^+e^-) ở trạng thái (0, 0), cũng như chuyển dời $(1, +1) \to (0, 0)$.

PHẦN IV

CHUYỂN ĐỘNG TRONG TRƯỜNG ĐIỆN TỪ

4001

Ta có thể tổng quát hóa hệ thức bán cổ điển Bohr-Sommerfeld

$$\oint \mathbf{P} \cdot d\mathbf{r} = (n + 1/2)\, h,$$

(ở đây tích phân lấy theo một quỹ đạo khép kín) để áp dụng cho trường hợp có mặt trường điện từ bằng cách thay thế $\mathbf{P}$ bằng $\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c$, trong đó e là điện tích của hạt. Sử dụng hệ thức này và phương trình chuyển động đối với xung lượng $\mathbf{p}$ để suy ra điều kiện lượng tử hóa áp đặt cho từ thông của một electron bán cổ điển trong một từ trường $\mathbf{B}$ và chuyển động trên một quỹ đạo bất kì. Đối với các electron trong các chất rắn điều kiện này có thể được phát biểu theo cách khác dưới dạng kích thước S của quỹ đạo trong không gian $\mathbf{k}$. Tìm điều kiện lượng tử hóa cho S thông qua B (Bỏ qua các hiệu ứng spin).

(Chicago)

Lời giải:

Dưới tác dụng của một trường điện từ, xung lượng cơ $\mathbf{P}$ là

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}/c\,,$$

ở đây $\mathbf{p}$ là xung lượng cổ điển, e là điện tích của hạt. Hệ thức tổng quát hóa Bohr-Sommerfeld trở thành

$$\oint \mathbf{P} \cdot d\mathbf{r} = \oint \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \cdot d\mathbf{r} = (n + 1/2)\, h\,,$$

hay

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} - \frac{e}{c}\phi = (n + 1/2)\, h\,,$$

ở đây

$$\phi = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{s} = \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}\,,$$

ở đây sử dụng định lý Stokes. Phương trình chuyển động cổ điển của một electron trong một từ trường không đổi $\mathbf{B}$,

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{e}{c}\frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B}\,,$$

dẫn đến $\mathbf{p} = -e\mathbf{r} \times \mathbf{B}/c$ và

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = -\oint \frac{e}{c}(\mathbf{r} \times \mathbf{B}) \cdot d\mathbf{r} = \int_S \frac{e}{c} \nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \cdot d\mathbf{s}$$

$$= \frac{e}{c} \int_S 2\mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = 2e\phi/c\,.$$

Như vậy

$$\phi = (n + 1/2)\,\phi_0\,,$$

ở đây $\phi_0 = hc/e$.

Định nghĩa $\mathbf{k}$ bằng $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} = -e\mathbf{r} \times \mathbf{B}/c$, và nếu giả thiết $\mathbf{r}$ vuông góc với $\mathbf{B}$, ta có

$$\hbar\Delta k = -Be\,\Delta r/c\,,$$

hay

$$\Delta r = -\hbar c\,\Delta k/Be\,.$$

Như vậy, nếu quỹ đạo chiếm một diện tích S_n trong không gian $\mathbf{k}$ và một diện tích A_n trong không gian $\mathbf{r}$ thì ta có hệ thức

$$A_n = (\hbar c/Be)^2\, S_n\,.$$

Do

$$\phi = \int B dA_n = \left(\frac{\hbar c}{Be}\right)^2 \int B dS_n = \left(\frac{\hbar c}{Be}\right)^2 B S_n = (n + 1/2)\,hc/e\,,$$

ta có

$$S_n = 2\pi Be(n + 1/2)/\hbar c\,.$$

4002

Một hạt có điện tích q và khối lượng m chịu tác dụng của một trường tĩnh điện đồng nhất $\mathbf{E}$.

(a) Hãy viết phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian cho hệ này.

(b) Hãy chỉ ra rằng giá trị kì vọng của toán tử vị trí tuân theo định luật thứ hai của Newton khi hạt ở một trạng thái bất kì $\psi(\mathbf{r}, t)$.

(c) Có thể chứng tỏ rằng kết quả này vẫn đúng nếu có tác dụng của một từ trường tĩnh đồng nhất. Các kết quả này có ứng dụng thực tiễn nào không trong việc thiết kế các thiết bị như khối phổ kế, máy gia tốc hạt, v.v? Giải thích.

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Phương trình Schrödinger cho hạt là

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - q\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}\psi .$$

(b) Hamiltonian của hạt là

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - q\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} .$$

Ta có

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [x, H] = \frac{1}{i\hbar} \left[x, \frac{p_x^2}{2m}\right] = \frac{p_x}{m} \frac{1}{i\hbar} [x, p_x] = \frac{p_x}{m} ,$$

$$\frac{dp_x}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p_x, H] = \frac{1}{i\hbar} [p_x, -E_x x] = -\frac{qE_x}{i\hbar} [p_x, x] = qE_x ,$$

hay

$$\frac{d\langle \mathbf{r} \rangle}{dt} = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m} ,$$

$$\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = q\mathbf{E} .$$

Suy ra

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{m} \frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} ,$$

hay

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{r} \rangle = q\mathbf{E} ,$$

đây chính là định luật thứ hai của Newton.

(c) Các kết quả chỉ rằng ta có thể sử dụng cơ học cổ điển một cách trực tiếp khi tính toán đường đi của một hạt mang điện trong các thiết bị như khối

phổ kế, máy gia tốc hạt, v.v.

4003

Một hạt tích điện, spin bằng không, chuyển động trong từ trường $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ có Hamiltonian là

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)^2,$$

ở đây e là điện tích cuả hạt, $\mathbf{p} = (p_x\, p_y,\, p_z)$ là xung lượng liên hợp với vị trí $\mathbf{r}$ của hạt. Đặt $A = -B_0 y \mathbf{e}_x$, tương ứng với một từ trường không đổi $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{e}_z$.

(a) Hãy chứng minh rằng p_x và p_z là các hằng số chuyển động.

(b) Hãy tìm các mức năng lượng (lượng tử) của hệ này.

(*MIT*)

Lời giải:

Hamiltonian của hạt có thể được viết dưới dạng

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x + \frac{eB_0}{c}y\right)^2 + \frac{1}{2m}p_y^2 + \frac{1}{2m}p_z^2.$$

(a) Do H không phụ thuộc vào x và z một cách tường minh nên từ các hệ thức giao hoán cơ bản trong cơ học lượng tử

$$[x_i,\, p_j] = i\hbar\delta_{ij},\ [p_i,\, p_j] = 0,$$

suy ra

$$[p_x,\, H] = 0,\ [p_z,\, H] = 0,$$

điều này chỉ ra rằng p_x, p_z là các hằng số chuyển động.

(b) Theo (a) ta có thể chọn $\{H,\, p_x,\, p_z\}$ là một tập đầy đủ của các biến cơ học. Hàm riêng tương ứng là

$$\psi(x,\, y,\, z) = e^{i(xp_x + zp_z)/\hbar}\,\phi(y),$$

ở đây p_x, p_z không còn là các toán tử nữa mà là các hằng số. Phương trình Schrödinger

$$H\psi(x,\, y,\, z) = E\psi(x,\, y,\, z)$$

dẫn đến

$$\frac{1}{2m}\left[\left(p_x + \frac{eB_0}{c}\,y\right)^2 - \hbar^2\frac{d^2}{dy^2} + p_z^2\right]\phi(y) = E\phi(y)\,,$$

hay

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dy^2} + \frac{m}{2}\left(\frac{eB_0}{mc}\right)^2\left(y + \frac{cp_x}{eB_0}\right)^2\phi = \left(E - \frac{p_z^2}{2m}\right)\phi\,.$$

Đặt

$$\omega = \frac{|e|\,B_0}{mc}\,,\ y' = y + \frac{cp_x}{eB_0}\,,\ E' = E - \frac{p_z^2}{2m}\,,$$

ta có thể viết phương trình trên trở thành

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dy'^2} + \frac{m}{2}\,\omega^2 y'^2\phi = E'\phi\,,$$

Đây là phương trình tìm năng lượng riêng của một dao động tử điều hòa một chiều. Do đó các trị riêng năng lượng bằng

$$E' = E - p_z^2/2m = (n + 1/2)\,\hbar\omega,\ \ n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots\,.$$

Do đó, các mức năng lượng của hệ là

$$E_n = p_z^2/2m + (n + 1/2)\,\hbar\omega,\ \ n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots\,.$$

4004

Một electron có khối lượng m và điện tích e chuyển động trong một vùng ở đó từ trường là đều $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ theo phương z.

(a) Xây dựng phương trình Schrödinger trong hệ tọa độ vuông góc.

(b) Giải phương trình tìm tất cả các mức năng lượng.

(c) Thảo luận về chuyển động của electron.

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Hamiltonian là

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2\,.$$

Do

$$\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} = 0\,,$$

$$\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} = 0\,,$$

$$\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = B\,,$$

nên ta có thể cho $A_x = A_z = 0$, $A_y = Bx$, tức là $\mathbf{A} = Bx\hat{\mathbf{y}}$, và viết phương trình Schrödinger dưới dạng như sau

$$\hat{H}\psi = \frac{1}{2m}\left[\hat{P}_x^2 + \left(\hat{P}_y + \frac{eBx}{c}\right)^2 + \hat{P}_z^2\right]\psi = E\psi.$$

(b) Do $[\hat{P}_y, \hat{H}] = [\hat{P}_z, \hat{H}] = 0$, nên P_y và P_z được bảo toàn. Chọn H, P_y, P_z là tập đầy đủ các biến cơ học và viết phương trình Schrödinger dưới dạng

$$\left[\frac{1}{2m}\,\hat{P}_x^2 + \frac{1}{2m}\left(\hat{P}_y + \frac{eBx}{c}\right)^2\right]\psi = \left(E - \frac{P_z^2}{2m}\right)\psi\,.$$

Đặt $\xi = x + cP_y/eB$, $\hat{P}_\xi = \hat{P}_x$. Do đó $[\xi, \hat{P}_\xi] = i\hbar$ và

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\,\hat{P}_\xi^2 + \frac{m}{2}\left(\frac{eB}{mc}\right)^2\xi^2 + \frac{1}{2m}\,\hat{P}_z^2\,.$$

Phương trình trên cho thấy $\hat{H} - \frac{\hat{P}_z^2}{2m}$ là Hamiltonian của một dao động tử điều hòa một chiều có tần số góc là $\omega = \frac{eB}{mc}$. Như vậy, các mức năng lượng của hệ là

$$E = (n + 1/2)\,\hbar\omega + P_z^2/2m, \quad n = 0, 1, 2, \ldots\,.$$

Do biểu thức của E không chứa P_y một cách tường minh, nên bậc suy biến của các mức năng lượng là vô hạn.

(c) Trong hệ tọa độ đã chọn, các trạng thái riêng năng lượng tương ứng với chuyển động tự do theo phương z và chuyển động tròn trong mặt phẳng $x - y$, tức là một chuyển động xoắn. Theo phương z, xung lượng cơ học $mv_z = P_z$ được bảo toàn, mô tả một chuyển động thẳng đều. Theo phương x tồn tại một dao động điều hòa quanh điểm cân bằng $x = -cP_y/eB$.

Theo phương y, xung lượng cơ học bằng $mv_y = P_y + eBx/c = eB\xi/c = m\omega\xi$ và do đó có một dao động điều hòa với cùng tần số và biên độ.

4005

Hãy viết Hamiltonian đối với một hạt tích điện spin bằng không chuyển động trong một từ trường. Chỉ ra rằng phép biến đổi chuẩn $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \to \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \nabla f(\mathbf{r})$ tương đương với việc nhân hàm sóng với thừa số exp $[ief(\mathbf{r})/\hbar c]$. Ý nghĩa vật lý của kết quả này là gì? Xét trường hợp một từ trường đều B hướng theo trục z. Chứng tỏ rằng các mức năng lượng có thể được viết thành

$$E = (n + 1/2)\,\frac{|e|\hbar}{mc}\,B + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\,.$$

Thảo luận các đặc trưng định tính của các hàm sóng.

Gợi ý: Sử dụng chuẩn trong đó $A_x = -By$, $A_y = A_z = 0$.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Hamiltonian của hạt là

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2,$$

ở đây $\mathbf{A}$ liên hệ với từ trường bởi hệ thức.

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}\,.$$

Phương trình Schrödinger như vậy là

$$\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2 \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})\,.$$

Giả thiết ta thực hiện phép biến đổi

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) \to \mathbf{A}'(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \nabla f(\mathbf{r})\,,$$

$$\psi(\mathbf{r}) \to \psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})\exp\left\{\frac{ie}{\hbar c}\,f(\mathbf{r})\right\},$$

và xét

$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}'\right)\psi'(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{p}}\psi'(\mathbf{r}) - \left[\frac{e}{c}\mathbf{A} + \frac{e}{c}\nabla f(\mathbf{r})\right]\exp\left[\frac{ie}{\hbar c}f(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r})$$

$$= \exp\left[\frac{ie}{\hbar c}f(\mathbf{r})\right]\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi(\mathbf{r}),$$

$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}'\right)^2\psi'(\mathbf{r}) = \exp\left[\frac{ie}{\hbar c}f(\mathbf{r})\right]\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi(\mathbf{r}).$$

ở đây ta đã sử dụng

$$\hat{\mathbf{p}}\,\psi'(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{i}\nabla\left\{\exp\left[\frac{ie}{\hbar c}f(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r})\right\} = \exp\left[\frac{ie}{\hbar c}f(\mathbf{r})\right]\left[\frac{e}{c}\nabla f(\mathbf{r}) + \hat{\mathbf{p}}\right]\psi(\mathbf{r}).$$

Thế vào phương trình Schrödinger ta được

$$\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}'\right)^2\psi'(\mathbf{r}) = E\psi'(\mathbf{r}).$$

Phương trình này cho thấy dưới phép biến đổi chuẩn $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f$, phương trình Schrödinger vẫn giữ nguyên dạng và chỉ có sự thay đổi về pha giữa hàm sóng ban đầu và hàm sóng mới. Như vậy, hệ có tính bất biến chuẩn.

Bây giờ xét trường hợp một từ trường đều $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = B\mathbf{e}_z$, trong đó ta có

$$A_x = -By, \quad A_y = A_z = 0.$$

Hamiltonian có thể được viết dưới dạng

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x + \frac{eB}{c}y\right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right].$$

Do $[\hat{p}_x, \hat{H}] = [\hat{p}_z, \hat{H}] = 0$ vì H không phụ thuộc tường minh vào x, z nên ta có thể chọn tập đầy đủ các biến cơ học là $(\hat{p}_x, \hat{p}_z, \hat{H})$. Tập này tương ứng với trạng thái riêng là

$$\psi(x, y, z) = e^{i(p_x x + p_z z)/\hbar}\chi(y).$$

Thay thế nó vào phương trình Schrödinger, ta có

$$\frac{1}{2m}\left[\left(p_x + \frac{eB}{c}y\right)^2 - \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial y^2} + p_z^2\right]\chi(y) = E\chi(y).$$

Đặt $cp_x/eB = -y_0$. Phương trình trên trở thành

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi'' + \frac{m}{2}\left(\frac{eB}{mc}\right)^2 (y-y_0)^2\chi = (E - p_z^2/2m)\chi\,,$$

đây là phương trình chuyển động của một dao động tử điều hòa. Như vậy, các mức năng lượng là

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k_z^2 + \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\frac{|e|B}{mc}\,, \quad n = 0, 1, 2, \dots\,,$$

ở đây $k_z = p_z/\hbar$, và các hàm sóng là

$$\psi_{p_x p_z n}(x, y, z) = e^{i(p_x x + p_z z)/\hbar}\chi_n(y-y_0)\,,$$

ở đây

$$\chi_n(y-y_0) \sim \exp\left[-\frac{|e|B}{2\hbar c}(y-y_0)^2\right] H_n\left(\sqrt{\frac{|e|B}{\hbar c}}(y-y_0)\right),$$

với H_n là các đa thức Hermite. Do các biểu thức năng lượng không phụ thuộc vào p_x và p_z một cách tường minh nên bậc suy biến là vô hạn theo p_x và p_z.

4006

Một chất điểm khối lượng m và điện tích q chuyển động trong các từ trường và điện trường đều $\mathbf{B} = B_0\hat{\mathbf{z}}$, $\mathbf{E} = E_0\hat{\mathbf{x}}$ đặt vuông góc với nhau trong không gian.

(a) Giải bài toán tìm phổ năng lượng.

(b) Đánh giá giá trị kì vọng của vận tốc v ở trạng thái xung lượng bằng không.

(Princeton)

Lời giải:

(a) Chọn chuẩn $\mathbf{A} = B_0 x\hat{\mathbf{y}}$, $\varphi = -E_0 x$ sao cho $\nabla\times\mathbf{A} = B_0\hat{\mathbf{z}}$, $-\nabla\cdot\varphi = E_0$. Như vậy

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + q\varphi = \frac{1}{2m}\left[p_x^2 + \left(p_y - \frac{q}{c}B_0 x\right)^2 + p_z^2\right] - qE_0 x\,.$$

Do H không phụ thuộc tường minh vào y và z nên p_y và p_z đều giao hoán với H, do đó p_y và p_z được bảo toàn. Như vậy, chúng có thể được thay thế trực tiếp bằng các trị riêng của chúng. Khi đó

$$H = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{q^2 B_0^2}{2mc^2} \left(x - \frac{cp_y}{qB_0} - \frac{c^2 m E_0}{qB_0^2} \right)^2 + \frac{1}{2m} p_z^2 - \frac{mc^2 E_0^2}{2B_0^2} - \frac{cp_y E_0}{B_0} = \frac{1}{2m} p_\xi^2 + \frac{m}{2} \omega^2 \xi^2 + \frac{1}{2m} p_z^2 - \frac{mc^2 E_0^2}{2B_0^2} - \frac{cp_y E_0}{B_0} ,$$

ở đây

$$p_\xi = p_x, \quad \xi = x - \frac{cp_y}{qB_0} - \frac{mc^2 E_0}{qB_0^2}$$

là cặp biến liên hợp mới. Đặt $\omega = |q| B_0/mc$. Bằng cách so sánh biểu thức của H với Hamiltonian của dao động tử điều hòa một chiều, ta thu được các trị riêng của H

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega + p_z^2/2m - mc^2 E_0^2/2B_0^2 - cp_y E_0/B_0 , \quad n = 0, 1, 2, \ldots .$$

Thực tế chỉ p_y và p_z, chứ không phải y và z xuất hiện trong biểu thức năng lượng vì thế bậc suy biến là vô hạn đối với p_y và p_z.

(b) Trạng thái xung lượng bằng không có nghĩa là trạng thái trong đó các trị riêng của p_y và p_z cũng như giá trị kì vọng của p_x tất cả đều bằng không. Do vận tốc của nó được định nghĩa là

$$\mathbf{v} = \frac{1}{m} \mathbf{p}_{\text{mec}} = \frac{1}{m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) .$$

nên giá trị kì vọng của nó là

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{m} \left\langle \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right\rangle = -\frac{q}{mc} \langle \mathbf{A} \rangle = -\frac{qB_0}{mc} \langle x \rangle \hat{\mathbf{y}} .$$

Khi đó, vì

$$\langle x \rangle = \langle \xi \rangle + \frac{cp_y}{qB_0} + \frac{mc^2 E_0}{qB_0^2} = \frac{mc^2 E_0}{qB_0^2} ,$$

do $\langle \xi \rangle = 0$ đối với một dao động tử điều hòa và do $p_y = 0$, nên ta có

$$\langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{cE_0}{B_0} \hat{\mathbf{y}} .$$

4007

Xác định các mức năng lượng bậc suy biến của chúng và các hàm riêng tương ứng của electron bị nhốt trong một khối lập phương có thể tích vô cùng lớn L^3. Electron trong một điện từ trường được đặc trưng bởi thế vectơ

$$\mathbf{A} = H_0 x\,\hat{\mathbf{e}}_y \quad (|\,\hat{\mathbf{e}}_y\,| = 1)\,.$$

(*Chicago*)

Lời giải:

Do $\mathbf{A} = H_0 x\,\hat{\mathbf{e}}_y$, nên ta có phương trình Schrödinger

$$\hat{H}\psi = \frac{1}{2m}\,[\hat{p}_x^2 + \hat{p}_z^2 + (\hat{p}_y - H_0 xe/c)^2]\,\psi = E\psi\,,$$

ở đây e là điện tích electron ($e < 0$).

Do $[\hat{H}, \hat{p}_y] = [\hat{H}, \hat{p}_z] = 0$, $[\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0$, nên ta có thể chọn $\hat{H}$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ làm tập đầy đủ các biến cơ học, hàm riêng tương ứng là

$$\psi = e^{i(p_y y + p_z z)/\hbar}\,\psi_0(x)\,,$$

ở đây p_y, p_z là các số thực bất kì. Thay thế hàm ψ vào phương trình Schrödinger ta được

$$\frac{1}{2m}\,[\hat{p}_x^2 + (eH_0/c)^2\,(x - cp_y/eH_0)^2]\,\psi_0 = E_0\psi_0\,,$$

ở đây $E_0 = E - p_z^2/2m$, hay

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,d^2\psi_0/dx^2 + \frac{m}{2}\,(H_0 e/cm)^2\,(x - x_0)^2\,\psi_0 = E_0\psi_0\,,$$

ở đây $x_0 = cp_y/eH_0$.

Phương trình cuối cùng là phương trình tìm năng lượng riêng của một dao động tử một chiều có tần số tự nhiên $\omega_0 = -H_0 e/mc$ và vị trí cân bằng $x = x_0$, các trị riêng năng lượng là

$$E_0 = (n + 1/2)\,\hbar\omega_0, \quad n = 0, 1, 2, \ldots\,,$$

hay

$$E = p_z^2/2m - (n + 1/2)\,H_0 e\hbar/mc, \quad n = 0, 1, 2, \ldots\,.$$

Các hàm riêng tương ứng là

$$\psi_{0n} \sim \exp\left[\frac{eH_0}{2\hbar c}(x-x_0)^2\right] H_n\left(-\frac{eH_0}{\hbar c}(x-x_0)\right),$$

ở đây H_n là các đa thức Hermite.

Do không có số hạng nào chứa p_y trong biểu thức của các mức năng lượng và p_y có thể là một số thực bất kì nên bậc suy biến của các mức là vô hạn.

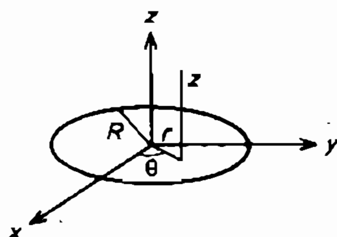
Do đó, các hàm riêng đối với hệ ban đầu sẽ là

$$\psi(\mathbf{x}) = C_n \exp\left[\frac{i(p_y y + p_z z)}{\hbar} + \frac{eH_0}{2\hbar c}(x-x_0)^2\right] \times H_n\left(-\frac{eH_0}{\hbar c}(x-x_0)\right),$$

ở đây C_n là hằng số chuẩn hóa.

4008

Xét một vòng dây tròn, mảnh, có bán kính R (Hình 4.1). Một từ trường không đổi vuông góc với mặt vòng dây tạo ra một từ thông đi qua vòng dây. Tưởng tượng rằng trong dây chỉ có một electron chuyển động tự do. Electron này có hàm sóng $\psi(\theta)$ phụ thuộc vào tọa độ góc θ. Bỏ qua tất cả các tương tác giữa spin electron và từ trường cũng như tất cả các từ trường tạo bởi bản thân electron.



Hình 4.1

(a) Năng lượng trạng thái cơ bản phụ thuộc như thế nào vào giá trị từ trường trong gần đúng ta đã mô tả? Suy ra công thức và cho một bức tranh sơ lược về kết quả này.

(b) Tưởng tượng rằng ta bắt đầu với sợi dây ở trạng thái cơ bản của nó với sự có mặt của từ thông ϕ. Sau đó từ trường được tắt đi. Hãy tính dòng điện chạy trong vòng dây.

(c) Tính dòng điện theo ampe, giả thiết $R = 2$ cm và $\phi = 0,6$ gauss cm ^{2}.

(*Chicago*)

Lời giải:

(a) Trong hệ tọa độ trụ r, θ, z, vì $\nabla \times \mathbf{A} = B\hat{\mathbf{e}}_z$ ở đây B là một hằng số, ta có thể lấy $A_r = A_z = 0$, $A_\theta = \frac{rB}{2}$, tức là, $\mathbf{A} = \frac{rB}{2}\hat{\mathbf{e}}_\theta$, và xét phương trình Schrödinger cho điện tử này,

$$\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 \psi = E\psi\,,$$

ở đây e là điện tích của electron ($e < 0$). Đặt

$$\psi = \psi' \exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\int^x \mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}\right).$$

Khi đó do

$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi = \exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\int^x \mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}\right)\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi'$$
$$= \exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\int^x \mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}\right)\hat{\mathbf{p}}\psi'\,,$$
$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi = \exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\int^x \mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}\right)\hat{\mathbf{p}}^2\psi'\,,$$

phương trình Schrödinger trở thành

$$\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2\psi' = E\psi'\,.$$

Do electron bị giới hạn trong vòng dây bán kính R, ta có

$$\psi = \psi(\theta) = \psi' \exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\int_{r=R} \mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}\right) = \psi' \exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\int^\theta AR\,d\theta\right)$$
$$\propto \psi' \exp\left(\frac{ie}{c\hbar}AR\theta\right).$$

Chú ý rằng $\psi' = \psi'(\theta)$ và $\hat{p} = -\frac{i\hbar}{R}\frac{d}{d\theta}$. Như vậy ta có

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{d^2\psi'(\theta)}{d\theta^2} = E\psi'(\theta)\,,$$

với nghiệm

$$\psi'(\theta) \sim e^{ic_1\theta},$$

ở đây c_1 là một hằng số được cho bởi $E = \frac{\hbar^2 c_1^2}{2mR^2}$. Như vậy

$$\psi(\theta) \sim \exp\left[i(c_1 + eAR/c\hbar)\,\theta\right].$$

Vì tính đơn trị, $\psi(\theta) = \psi(\theta + 2\pi)$, tức là,

$$2\pi\,(c_1 + eAR/c\hbar) = 2n\pi,$$

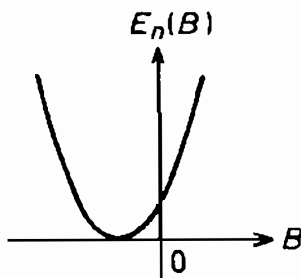
với n bằng không hoặc bằng một số nguyên $(0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$. Giải phương trình tìm c_1, ta có

$$c_1 = n - eAR/c\hbar = n - eR^2B/2c\hbar,$$

và do đó

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\,(n - eR^2B/2c\hbar)^2 = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\,(n + \phi/\phi_0)^2,$$

ở đây $\phi = \pi R^2 B$, $\phi_0 = -ch/e$. Ta thấy rằng sự phụ thuộc của E_n vào từ trường ngoài B hay từ thông ϕ tuân theo hàm parabol như chỉ ra trên Hình 4.2.



Hình 4.2

Do n là số nguyên, năng lượng trạng thái cơ bản E_g (mức năng lượng thấp nhất) được tính bởi

$$E_g = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\left[n^* - eR^2B/2c\hbar\right]^2,$$

ở đây n^* là số nguyên gần nhất với $eR^2B/2c\hbar$ (hay $e\phi/ch$), có giá trị âm vì đối với một electron e là âm.

(b) Giả thiết ta bắt đầu với một trạng thái E_n là trạng thái cơ bản, n sẽ giữ nguyên khi tắt B đi. Như vậy, hàm sóng sẽ là $\psi = C\exp(in\theta)$ và mật độ dòng là

$$\mathbf{j} = e\,\frac{\hbar}{2mi}\,(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)\,|_{r=R} = \frac{e\hbar}{2mi}\,(in)\,\frac{2}{R}\,\psi^*\psi\hat{e}_\theta$$
$$= \frac{e\hbar n}{mR}\,\psi^*\psi\hat{e}_\theta\,,$$

ở đây C là hằng số chuẩn hóa. Đặt S là tiết diện của dây mảnh. Ta có dạng của điều kiện chuẩn hóa.

$$\int \psi^*\psi\,dl\,dS = 2\pi R\,|\,C\,|^2 S = 1$$

tức là

$$|\,C\,|^2 = \frac{1}{2\pi RS}\,.$$

Như vậy

$$I = \int \mathbf{j}\cdot d\mathbf{S} = \frac{e\hbar n}{mR}\,|\,C\,|^2 S = \frac{e\hbar n}{2\pi mR^2}\,.$$

Lưu ý rằng j được xem như đồng nhất với bất kì tiết diện như thế nào vì dây là mảnh.

Do electron ban đầu ở trạng thái cơ bản, E_n là cực tiểu nên ta có

$$n = \left[\frac{e\phi}{ch}\right] \quad \text{hay} \quad \left[\frac{e\phi}{ch}\right] - 1\,,$$

ở đây $[A]$ kí hiệu số nguyên lớn nhất không vượt quá A.

Đối với trường hợp các độ lớn vĩ mô như trong phần (c), các số lượng tử có trị số lớn nên ta có thể lấy một cách đơn giản $n \approx e\phi/ch$, trong trường hợp đó

$$I \approx e^2\phi/4\pi^2 R^2 mc\,.$$

(c) Với $R = 2$ cm, $\phi = 0,6$ gauss cm^2, ta có theo hệ SI

$$I = e^2\phi/4\pi^2 R^2 m = (1,6\times 10^{-19})^2 \times 0,6\times 10^{-4}\times 10^{-4}/[4\pi^2$$
$$\times (2\times 10^{-2})^2 \times 0,9\times 10^{-30}] = 1,1\times 10^{-14}\ A\,.$$

4009

(a) Giả thiết rằng cơ học lượng tử phi tương đối tính bất biến đối với phép nghịch đảo thời gian, hãy suy ra dạng nghịch đảo thời gian của hàm sóng Schrödinger.

(b) Viết Hamiltonian cơ học lượng tử cho một electron tự do với mômen từ μ trong từ trường ngoài không đổi H_z theo phương z trong hệ quy chiếu của electron?

(c) Giả thiết rằng một từ trường không đổi khác H_y theo phương y. Xác định dạng toán tử cơ học lượng tử đối với tốc độ thay đổi theo thời gian của μ trong trường hợp này.

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Xét phương trình Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = \hat{H}\psi(t) .$$

Thực hiện phép biến đổi nghịch đảo thời gian $t \to -t$, ta thu được

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(-t) = \hat{H}(-t)\psi(-t) ,$$

hay

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(-t) = \hat{H}^*(-t)\psi^*(-t) .$$

Nếu $\hat{H}^*(-t) = \hat{H}(t)$, thì phương trình Schrödinger là hiệp biến dưới phép nghịch đảo thời gian và dạng nghịch đảo theo thời gian của hàm sóng là $\psi^*(-t)$.

(b) Đặt e là điện tích của electron. Vậy thì $\mu = -\frac{e\hbar}{2mc}\sigma$ và trong hệ quy chiếu của electron,

$$\hat{H} = -\mu \cdot \mathbf{H} = -\mu_z H_z = \frac{e\hbar}{2mc}\sigma_z H_z .$$

(c) Từ trường bây giờ là $H_y\hat{\mathbf{y}} + H_z\hat{\mathbf{z}}$, và do đó

$$\hat{H} = \frac{e\hbar}{2mc}(\sigma_z H_z + \sigma_y H_y) ,$$

như vậy

$$\frac{d\mu}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\mu, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2 [-\sigma_x\hat{\mathbf{x}} - \sigma_y\hat{\mathbf{y}} - \sigma_z\hat{\mathbf{z}},$$

$$\sigma_z H_z + \sigma_y H_y] = \frac{2}{\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2 [(\sigma_y H_z - \sigma_z H_y)\,\hat{x} - \sigma_x H_z \hat{y}$$

$$+ i\sigma_x H_y \hat{z}] = \frac{2}{\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2 \sigma \times \mathbf{H}$$

$$= \frac{e}{mc}\mathbf{H} \times \mu,$$

ở đây ta đã sử dụng các hệ thức $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$, $\sigma_y\sigma_z = i\sigma_x$, $\sigma_z\sigma_x = i\sigma_y$.

4010

Một hạt có khối lượng m, điện tích q, mômen spin s (s không nhất thiết bằng $\hbar/2$) và một mômen lưỡng cực từ $\mu = gq\mathrm{s}/2mc$. Hạt chuyển động trong một từ trường đều **B** với vận tốc nhỏ so với c.

(a) Viết Hamiltonian cho hệ này. (Thế vectơ đối với từ trường có thể được viết dưới dạng $\mathbf{A} = \mathbf{B} \times \mathbf{r}/2$).

(b) Hãy suy ra các phương trình cơ học lượng tử (Heisenberg) cho chuyển động từ Hamiltonian này, đối với xung lượng **P** và mômen spin s. Số hạng A^2 có thể được bỏ qua trong gần đúng phi tương đối.

(Chú ý rằng các kết quả sẽ giống hệt như các phương trình chuyển động cổ điển).

(c) Không cần giải các phương trình này, hãy xác định giá trị của hằng số g để độ xoắn giữ nguyên không đổi. (Độ xoắn được định nghĩa ở đây là cosin của góc giữa các vectơ **P** và s)

(d) Các giá trị thực tế của hằng số g đối với các hạt e, p, n, π bằng bao nhiêu?

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Hamiltonian của hệ là

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{P} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \mu \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{2m}\mathbf{P}^2 - \frac{q}{mc}\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}$$

$$+ \frac{q^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 - \frac{gq}{2mc}\mathbf{s} \cdot \mathbf{B}.$$

(b) Bỏ qua các số hạng A^2 và các số hạng bậc cao hơn trong biểu thức của H, ta được

$$\frac{dP_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[P_i, H] = \frac{1}{i\hbar}\left[P_i, -\frac{q}{mc}\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} - \frac{gq}{2mc}\mathbf{s} \cdot \mathbf{B}\right] = \frac{iq}{\hbar mc}[P_i, A_j P_j]$$

$$= \frac{iq}{\hbar mc}(P_i A_j P_j - A_j P_j P_i)$$

$$= \frac{iq}{\hbar mc}[(P_i A_j) P_j + A_j P_i P_j - A_j P_j P_i]$$

$$= \frac{iq}{\hbar mc}(P_i A_j) P_j = \frac{q}{mc}(\partial_i A_j) P_j .$$

$$\frac{ds_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[s_i, H] = \frac{1}{i\hbar}\left[s_i, -\frac{gq}{2mc}\mathbf{s} \cdot \mathbf{B}\right]$$

$$= \frac{igq}{2\hbar mc}[s_i, s_j B_j]$$

$$= \frac{-gq}{2mc}(B_j s_k - B_k s_j)$$

$$= -\frac{gq}{2mc}(\mathbf{B} \times \mathbf{s})_i ,$$

do $[s_i, s_j] = i\hbar s_k$. Chú ý rằng ở đây ta đã sử dụng quy ước lấy tổng theo các chỉ số lặp.

(c) Do $\mathbf{P}$ và $\mathbf{s}$ giao hoán nên ta có thể xét bài toán theo các trạng thái chung của $\mathbf{P}$, $\mathbf{s}^2$ và s_z.

Độ xoắn h được định nghĩa như sau

$$h = \mathbf{P} \cdot \mathbf{s}/|\mathbf{P}|\,|\mathbf{s}| = \frac{P_i s_i}{|\mathbf{P}|\,|\mathbf{s}|},$$

và do

$$\mathbf{A}_i = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})_i = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk} B_j x_k ,$$

ta có

$$\begin{aligned}\left[h,\ -\frac{q}{mc}\mathbf{A}\cdot\mathbf{P}\right] &= \frac{-q}{mc|\mathbf{s}||\mathbf{P}|}[s_iP_i,\ A_jP_j]\\ &= \frac{-qs_i}{mc|\mathbf{s}||\mathbf{P}|}[P_i,\ A_jP_j]\\ &= \frac{qs_iP_j}{mc|\mathbf{s}||\mathbf{P}|}\left(\frac{i\hbar}{2}\right)\frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon_{jkl}B_kx_l)\\ &= \frac{i\hbar q}{2mc}\varepsilon_{jkl}\frac{s_i}{|\mathbf{s}|}\frac{P_j}{|\mathbf{P}|}B_k\delta_{il}\\ &= \frac{i\hbar q}{2mc}\varepsilon_{ijk}\frac{s_i}{|\mathbf{s}|}\frac{P_j}{|\mathbf{P}|}B_k,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\left[h,\ -\frac{gq}{2mc}\mathbf{s}\cdot\mathbf{B}\right] &= \frac{-gq}{2mc|\mathbf{s}||\mathbf{P}|}[s_iP_i,\ s_jB_j]\\ &= \frac{-gq\,P_i}{2mc|\mathbf{s}||\mathbf{P}|}[s_i,\ s_jB_j]\\ &= -\frac{i\hbar gq}{2mc}\varepsilon_{ijk}\frac{s_i}{|\mathbf{s}|}\frac{P_j}{|\mathbf{P}|}B_k.\end{aligned}$$

Nếu độ xoắn là một hằng số chuyển động thì

$$[h,\ H] = \left[h,\ -\frac{q}{mc}\mathbf{A}\cdot\mathbf{P}\right] + \left[h,\ -\frac{gq}{2mc}\mathbf{s}\cdot\mathbf{B}\right] = 0,$$

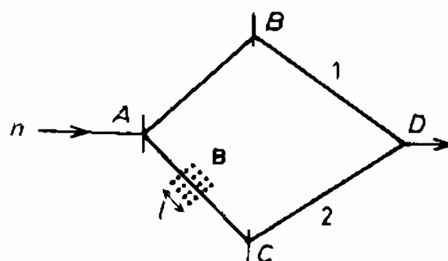
suy ra $g = 1$.

(d) Các giá trị g của các hạt khác nhau là

Hạt	e	p	n	π
g	$-2,0$	5,6	$-3,8$	0

4011

Trong một thí nghiệm cổ điển một chùm nơtron đơn sắc ($\lambda = 1,445$ Å) được phân tách nhờ phản xạ Bragg tại điểm A của một giao thoa kế thành hai chùm và sau đó được tổ hợp lại (sau một lần phản xạ nữa) tại điểm D (xem Hình 4.3). Một chùm đi qua một vùng có từ trường B tác dụng theo phương



Hình 4.3

ngang trên một khoảng cách bằng l. Giả thiết rằng hai quang trình từ A đến D là như nhau ngoại trừ một bên có vùng từ trường tác dụng.

Tìm các biểu thức tường minh của cường độ tại D phụ thuộc vào **B**, l và bước sóng nơtron, với nơtron phân cực song song hoặc phản song song với chiều từ trường.

(*Chicago*)

Lời giải:

Đây là một bài toán về giao thoa spinor. Xét một nơtron của chùm. Vùng ở đó có từ trường **B** thì phương trình Schrödinger cho nơtron (không điện tích) sẽ là

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu\sigma\cdot\mathbf{B}\right)\psi = E\psi\,.$$

Giả thiết **B** là đều và không đổi, ta có

$$\psi(t_1) = \exp\left[-i\hat{H}(t_1 - t_0)/\hbar\right]\psi(t_0)\,,$$

ở đây t_0, t_1 tương ứng là các thời điểm khi nơtron đó vào và ra khỏi từ trường.

Viết $\psi(t) = \psi(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{s}, t)$, ở đây $\psi(\mathbf{r}, t)$ và $\psi(\mathbf{s}, t)$ tương ứng là các phần không gian và spin của ψ. Khi đó,

$$\psi(\mathbf{r}, t_1) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)(t_1 - t_0)\right]\psi(\mathbf{r}, t_0)\,,$$

giống như hàm sóng của một hạt tự do, và

$$\psi(\mathbf{s}, t_1) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\mu\sigma\cdot\mathbf{B}\,(t_1 - t_0)\right]\psi(s, t_0)\,.$$

Hiện tượng giao thoa xuất hiện do tác dụng của B lên hàm sóng spin. Do $\psi(\mathbf{r}, t)$ là hàm sóng của một hạt tự do, ta có $t_1 - t_0 = l/v = ml/\hbar k$ và

$$\psi(\mathbf{s}, t_1) = \exp\left[i2\pi\mu ml\lambda\sigma \cdot \mathbf{B}/h^2\right]\psi(s, t_0),$$

ở đây $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{mv}{\hbar}$ là số sóng của nơtron. Cường độ giao thoa của hai chùm tia tại D như vậy tỉ lệ với

$$|\psi_D^{(1)}(\mathbf{r}, t)\psi_D^{(1)}(\mathbf{s}, t) + \psi_D^{(2)}(\mathbf{r}, t)\psi_D^{(2)}(\mathbf{s}, t)|^2$$
$$\propto |\psi_D^{(1)}(\mathbf{s}, t) + \psi_D^{(2)}(\mathbf{s}, t)|^2 = |\psi^{(2)}(\mathbf{s}, t_0) + \psi^{(2)}(\mathbf{s}, t_1)|^2 .$$

Do

$$\exp\left(i\,\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}\,\sigma \cdot \mathbf{B}\right) = \cos\frac{2\pi\mu ml\lambda B}{h^2} + i\sigma \cdot \frac{\mathbf{B}}{B} \times \sin\frac{2\pi\mu ml\lambda B}{h^2},$$

và $\sigma \cdot \mathbf{B} = \pm\sigma B$ phụ thuộc vào σ song song hoặc phản song với $\mathbf{B}$, ta có

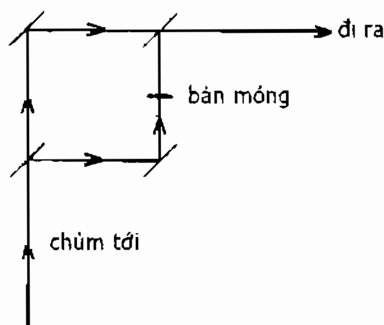
$$\begin{aligned}|\psi^{(2)}(\mathbf{s}, t_0) + \psi^{(2)}(\mathbf{s}, t_1)|^2 &= \left|1 + \exp\left(i\,\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}\,\sigma \cdot \mathbf{B}\right)\right|^2 |\psi(\mathbf{s}, t_0)|^2 \\ &= \left|1 + \cos\frac{2\pi\mu ml\lambda B}{h^2} \pm i\sigma\sin\frac{2\pi\mu ml\lambda B}{h^2}\right|^2 \\ &= \left(1 + \cos\frac{2\pi\mu ml\lambda B}{h^2}\right)^2 \\ &\quad + \sin^2\frac{2\pi\mu ml\lambda B}{h^2} = 4\cos^2\frac{\pi\mu ml\lambda B}{h^2} .\end{aligned}$$

Do đó, cường độ giao thoa tại $D \propto \cos^2(\pi\mu ml\lambda B/h^2)$, trong đó μ là mômen từ riêng của nơtron ($\mu < 0$).

4012

Một bộ tách tia và một số gương của giao thoa kế nơtron trình bày trên Hình 4.4 được xây dựng từ một vật liệu đơn tinh thể.

(a) Bằng cách thay đổi chiều dày của bản mỏng đặt chắn chùm tia ở một bên của giao thoa kế có thể thay đổi pha tương đối và như vậy sẽ làm dịch các



Hình 4.4

vân giao thoa. Hãy đưa ra một cách giải thích ngắn gọn về bản chất của sự dịch pha đó.

(b) Bằng cách đưa thêm từ trường vào một bên cánh của giao thoa kế với phương vuông góc với phương truyền của chùm tia. Từ trường này không phụ thuộc thời gian và gần như đều sao cho lực tác dụng lên các hạt nơtron có thể bỏ qua, sự chọn từ trường cũng làm sao để cho mỗi một vectơ spin nơtron tiến động chỉ qua một phép quay thì sự lệch pha tương đối của hai chùm tia là π radian, hay bằng nửa chu kì. Giải thích tại sao lại như vậy, bằng cách sử dụng các phương trình thích hợp.

(*Princeton*)

Lời giải:

(a) Khi một nơtron đi qua một tấm nhựa mỏng, nó chịu một thế tác dụng phụ thêm, và do đó xung lượng của nó thay đổi cùng với bước sóng de Broglie của nó. Sự thay đổi pha của nơtron khi nó đi qua tấm nhựa mỏng khác với khi nó đi qua một môi trường chân không có cùng độ dày. Nếu độ dày của tấm nhựa bị thay đổi thì pha tương đối của hai tia (xuất phát từ một tia ban đầu) cũng thay đổi, dẫn đến sự dịch các vân giao thoa.

(b) Nơtron có mômen từ dị thường $\mu_n = -\mu_n \sigma$ và phương trình Schrödinger là

$$(\mathbf{p}^2/2m_n + \mu_n \sigma \cdot \mathbf{B})\psi = E\psi \,.$$

Ta có thể bỏ qua quá trình phản xạ xảy ra khi một sóng nơtron đi tới bề mặt của vùng từ trường do tác dụng của từ trường lên nơtron là tương đối yếu. Với gần đúng như vậy ta có thể chỉ ra rằng (bằng cách giải phương trình Schrödinger cho hai thành phần spin ở trên cho một hố thế một chiều). Hàm

sóng $\psi_{\text{tới}}$ của nơtron tới vuông góc với chiều từ trường liên hệ với hàm sóng truyền qua ra khỏi từ trường ψ_{out} bởi phép biến đổi đơn vị

$$\psi_{\text{out}} = \exp\left(-i\sigma \cdot \rho/2\right) \psi_{\text{tia tới}},$$

ở đây $\rho = \omega_L \tau \mathbf{e}_B$, với $\omega_L = 2\mu_n B/\hbar$ là tần số Larmor, $\tau = Lm_n/\hbar k$ là thời gian nơtron đi qua từ trường có chiều dày L, $\mathbf{e}_B$ là vectơ đơn vị theo phương của $\mathbf{B}$, k là số sóng của nơtron tới.

Nếu một nơtron bị phân cực theo hướng (θ, φ) trước khi đi tới từ trường, tức là vectơ phân cực của nó là

$$\langle \psi_{\text{tia tới}} | \sigma | \psi_{\text{tia tới}} \rangle = \{\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta\},$$

vậy ta có thể lấy

$$\psi_{\text{tia tới}} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi/2}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}},$$

ở đây θ là góc vectơ phân cực tạo với phương của từ trường. Lấy phương từ trường trùng với phương z, ta có $\rho \cdot \sigma = \rho\sigma_z$. Khi đó do

$$\exp\left(-i\frac{\rho}{2}\sigma_z\right) = \cos\frac{\rho}{2} - i\sigma_z\sin\frac{\rho}{2} = \cos\frac{\rho}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$$
$$- i\sin\frac{\rho}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\rho/2} & 0 \\ 0 & e^{i\rho/2}\end{pmatrix},$$

ta có

$$\psi_{\text{out}} = \begin{pmatrix} e^{-i\rho/2} & 0 \\ 0 & e^{i\rho/2}\end{pmatrix}\psi_{\text{tia tới}} = \begin{pmatrix} e^{-i(\varphi+\rho)/2}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i(\varphi+\rho)/2}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}.$$

Bằng cách điều chỉnh $\mathbf{B}$ (hoặc L) sao cho $\rho = 2\pi$, ta làm cho vectơ phân cực của một nơtron tiến động qua một phép quay khi nó đi qua vùng từ trường. Như vậy

$$\psi_{\text{out}} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi/2}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}+\pi)},$$

tức là pha của sóng truyền qua tăng lên một lượng bằng π. Như vậy, so với sóng đi qua nhánh bên kia của giao thoa kế (không có từ trường tác dụng) sự lệch pha tương đối của chùm tia đã thay đổi một nửa chu kì.

4013

(a) Một nguyên tử hydro ở trạng thái $2P$ của nó với $L_x = +\hbar$. Tại thời điểm $t = 0$, một từ trường mạnh cường độ $|\mathbf{B}|$ chỉ theo hướng z được bật lên. Giả thiết rằng các hiệu ứng của spin electron có thể được bỏ qua, hãy tính sự phụ thuộc thời gian của giá trị kì vọng của L_x.

(b) Từ trường ở câu (a) phải mạnh đến thế nào để hiệu ứng của spin electron có thể thực sự được bỏ qua? Câu trả lời phải được biểu diễn qua các đơn vị vĩ mô chuẩn.

(c) Giả thiết thay vì trường hợp trên, từ trường bây giờ có cường độ rất yếu. Giả thiết tiếp, tại $t = 0$, nguyên tử có $L_x = +\hbar$ và $s_x = \frac{1}{2}\hbar$, và từ trường vẫn hướng theo phương z. Hãy nói phác qua bạn sẽ tính toán sự phụ thuộc thời gian của giá trị kì vọng của L_x như thế nào trong trường hợp này. Bạn không cần tính toán đầy đủ, nhưng giải thích rõ ràng các bước phải làm.

Chú ý: Tất cả các hiệu ứng của spin hạt nhân được bỏ qua trong bài toán này.

(Princeton)

Lời giải:

(a) Hàm sóng ban đầu của nguyên tử là

$$\psi(\mathbf{r},\, t = 0) = R_{21}(r)\,\Theta(\theta,\, \varphi)\,,$$

Ở đây

$$\Theta(\theta,\, \varphi) = \frac{1}{2}\left(Y_{11} + Y_{1,-1} + \sqrt{2}\, Y_{10}\right),$$

là trạng thái riêng của $L_x = \hbar$.

Tại $t = 0$, một từ trường mạnh $B\mathbf{e}_z$ được bật lên. Sau đó với $t \geq 0$, Hamiltonian của hệ là

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + \frac{eBl_z}{2m_e c} + \frac{e^2B^2(x^2 + y^2)}{8m_e c^2} - \frac{e^2}{r}\,.$$

Đối với từ trường không quá mạnh $B \sim 10^5$ Gs, ta có thể bỏ qua số hạng

B^2 và viết dạng Hamiltonian như sau

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + \frac{eBl_z}{2m_e c} - \frac{e^2}{r}.$$

Phương trình Schrödinger

$$i\hbar\,\partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi$$

như vậy dẫn đến các nghiệm trạng thái riêng

$$\psi_n(\mathbf{r},\,t) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\,\varphi)\,e^{-iE_{nlm}t/\hbar},$$

ở đây

$$E_{nlm} = E_{nl} + \frac{eB}{2m_e c}m\hbar.$$

Như vậy, nghiệm tổng quát là

$$\psi(\mathbf{r},\,t) = \sum_{n,l,m} a_n\psi_{nlm}(\mathbf{r})\exp\left(-i\frac{E_{nlm}}{\hbar}t\right).$$

Đối với $t = 0$ thì ta có

$$\sum_{n,l,m} a_n\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{21}(r)\left(\frac{1}{2}Y_{11} + \frac{1}{2}Y_{1-1} + \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{10}\right),$$

hay

$$a_2\psi_{211}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}, \quad \text{v.v.}$$

Như vậy

$$\psi(\mathbf{r},\,t) = R_{21}(r)\left[\frac{1}{2}Y_{11}\exp\left(-i\frac{E_{211}}{\hbar}t\right)\right.$$
$$+\frac{1}{2}Y_{1-1}\exp\left(-i\frac{E_{21-1}}{\hbar}t\right)$$
$$\left.+\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{10}\exp\left(-i\frac{E_{210}}{\hbar}t\right)\right].$$

Giá trị kì vọng của L_x được tính bởi $\langle\psi(\mathbf{r}, t) \mid L_x \mid \psi(\mathbf{r}, t)\rangle$. Do $L_x = (L_+ + L_-)/2$,

$$L_+ Y_{lm} = \hbar \sqrt{(l + m + 1)(l - m)}\, Y_{l, m+1} ,$$
$$L_- Y_{lm} = \hbar \sqrt{(l - m + 1)(l + m)}\, Y_{l, m-1} ,$$

ta có

$$L_x Y_{11} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} Y_{10}, \quad L_x Y_{1-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} Y_{10} ,$$
$$L_x Y_{10} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} (Y_{11} + Y_{1-1}) ,$$

và như vậy

$$\overline{L_x(t)} = \langle\psi(\mathbf{r}, t) \mid L_x \mid \psi(\mathbf{r}, t)\rangle = \hbar \cos \frac{eBt}{2m_e c} .$$

(b) Các hiệu ứng của spin electron có thể được bỏ qua nếu năng lượng phụ thêm do từ trường mạnh là rất lớn so với năng lượng tương tác spin - quỹ đạo, tức là

$$\frac{e\hbar B}{2m_e c} \gg \Delta E_{\text{spin-quỹ đạo}} \approx 10^{-3} \text{ eV} ,$$

hay

$$B \geq 10^6 \text{ Gs} .$$

Như vậy, khi từ trường B lớn hơn 10^6 Gs, thì các hiệu ứng của spin electron có thể được bỏ qua.

(c) Nếu từ trường rất yếu thì các hiệu ứng của spin electron phải được tính đến. Để tính sự phụ thuộc thời gian của giá trị kì vọng L_x, ta đi theo các bước như sau.

(i) Hamiltonian bây giờ có dạng

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{2m_e^2 c^2 r^3} (\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{L}}) + \frac{eB}{2m_e c} \hat{J}_z + \frac{eB}{2m_e c} \hat{s}_z ,$$

đây là Hamiltonian đối với hiệu ứng Zeeman dị thường và ta có thể sử dụng biểu diễn liên kết. Khi tính toán năng lượng phụ thêm do số hạng $\hat{s}_x$, ta có xem $\hat{s}_x$ gần như là chéo hóa trong biểu diễn này.

(ii) Viết hàm sóng phụ thuộc thời gian thỏa mãn điều kiện ban đầu $L_x = +\hbar$ và $s_x = \frac{1}{2}\hbar$. Tại thời điểm $t = 0$, hàm sóng là

$$\psi_0(\mathbf{r}, s_x) = R_{21}(r)\, \Theta(\theta, \varphi)\, \phi_s ,$$

ở đây Θ và ϕ_s lần lượt là các hàm riêng của $L_x = \hbar$ và $s_x = \hbar/2$ trong các biểu diễn (l^2, l_z), (s^2, s_z). Một cách tường minh ta có

$$\psi_0(\mathbf{r}, s_x) = R_{21}(r)\,\frac{1}{2}\,[Y_{11} + Y_{1-1} + \sqrt{2}\,Y_{10}]\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\alpha + \beta)$$
$$= \frac{R_{12}(r)}{2\sqrt{2}}\,(Y_{11}\alpha + Y_{11}\beta + Y_{1-1}\alpha + Y_{1-1}\beta$$
$$+ \sqrt{2}\,Y_{10}\alpha + \sqrt{2}\,Y_{10}\beta)\,.$$

Do

$$\phi_j = \frac{3}{2},\ m_j = \frac{3}{2} = Y_{11}\alpha, \qquad \phi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{3}}\,Y_{11}\beta + \sqrt{\frac{2}{3}}\,Y_{10}\,\alpha\,,$$
$$\phi_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{3}}\,Y_{1-1}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}\,Y_{10}\beta, \quad \phi_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}} = Y_{1-1}\beta\,,$$

ψ_0 có thể được viết trong biểu diễn liên kết như là

$$\psi_0(\mathbf{r}, s_x) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\,R_{21}(r)\,(\phi_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}} + \sqrt{3}\,\phi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}$$
$$+ \sqrt{3}\,\phi_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}} + \phi_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}})\,,$$

ở đây ϕ_{jm_j} là hàm riêng của (j^2, j_z) ứng với mức năng lượng E_{nljm_j}.

Do vậy, hàm sóng phụ thuộc thời gian của hệ là

$$\psi(\mathbf{r}, s, t) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\,R_{21}(r)\cdot\left[\phi_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}\exp\left(-i\,\frac{E_{21\frac{3}{2}\frac{3}{2}}}{\hbar}\,t\right)\right.$$
$$+ \sqrt{3}\,\phi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}\exp\left(-i\,\frac{E_{21\frac{3}{2}\frac{1}{2}}}{\hbar}\,t\right)$$
$$+ \sqrt{3}\,\phi_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}\exp\left(-i\,\frac{E_{21\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}}{\hbar}\,t\right)$$
$$\left.+ \phi_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}\exp\left(-i\,\frac{E_{21\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}}{\hbar}\,t\right)\right].$$

(iii) Tính giá trị kì vọng của L_x theo cách thông thường

$$\langle\psi(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t)\,|\,L_x\,|\,\psi(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t)\rangle\,.$$

4014

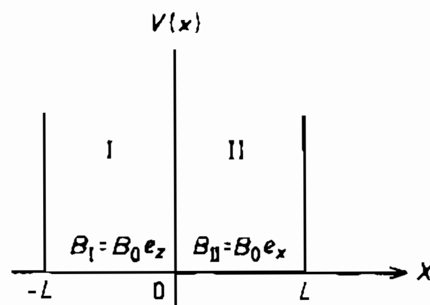
Xét chuyển động một chiều của một hạt không tích điện có spin 1/2 và mômen từ $\mu = -2\mu_0 \mathbf{s}/\hbar$. Hạt bị giới hạn trong một hố thế vuông góc sâu vô hạn trải trong khoảng từ $x = -L$ tới $x = L$. Trong vùng I ($x < 0$) có một từ trường đều theo phương z $\mathbf{B} = B_0\mathbf{e}_z$; trong vùng II ($x > 0$) có một từ trường đều có cùng độ lớn nhưng hướng theo phương x $\mathbf{B} = B_0\mathbf{e}_x$. Ở đây, $\mathbf{e}_x$ và $\mathbf{e}_z$ là các vectơ đơn vị theo các phương x và z.

(a) Sử dụng lý thuyết nhiễu loạn để tìm năng lượng trạng thái cơ bản và hàm sóng cơ bản (cả hai phần không gian và spin) trong giới hạn trường yếu $B_0 \ll (\hbar/L)^2/2m\mu_0$.

(b) Bây giờ xét các trường với B_0 có độ lớn bất kì. Hãy tìm dạng tổng quát của hàm riêng năng lượng ψ_I (cả hai phần không gian và spin) trong vùng I thỏa mãn các điều kiện biên bên trái. Tìm cả dạng ψ_{II} của hàm riêng trong vùng II thỏa mãn điều kiện biên bên phải (Hình 4.5).

(c) Tìm phương trình định thức tường minh mà nghiệm của nó cho các trị riêng năng lượng E.

(MIT)



Hình 4.5

Lời giải:

(a) Khi không có từ trường, $H = H_0$ và các hàm riêng năng lượng (phần không gian) và các trị riêng tương ứng là

$$\psi_n = \sqrt{1/L}\sin\frac{n\pi(x+L)}{2L},$$

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots .$$

Còn đối với phần spin, ta biết rằng mỗi một mức năng lượng có suy biến bậc 2. Khi xuất hiện một từ trường, $H = H_0 + H'$, ở đó

$$H' = -\mu\cdot\mathbf{B} = \frac{2\mu_0\mathbf{s}\cdot\mathbf{B}}{\hbar} = \mu_0\sigma\cdot\mathbf{B} = \begin{cases}\mu_0 B_0\sigma_z\,, & -L\le x\le 0\,,\\ \mu_0 B_0\sigma_x\,, & 0\le x\le L\,,\\ 0 & \text{với } x \text{ ở ngoài các khoảng trên}\,.\end{cases}$$

Nếu từ trường yếu, đặt $u_1 = \psi_1(x)\binom{1}{0}$, $u_2 = \psi_1(x)\binom{0}{1}$ là các vectơ cơ sở. Khi đó

$$\begin{aligned}
H'_{11} &= \langle u_1\,|\,H'\,|\,u_1\rangle = \mu_0 B_0(1\ \ 0)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\
&\quad\times\int_{-L}^{0}\psi_1^*(x)\,\psi_1(x)\,dx = \frac{\mu_0 B_0}{2}\,,\\
H'_{21} &= H'_{12} = \langle u_1\,|\,H'\,|\,u_2\rangle\\
&= \mu_0 B_0(1\ \ 0)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\int_0^L\psi_1^*(x)\,\psi_1(x)\,dx = \frac{\mu_0 B_0}{2}\,,\\
H'_{22} &= \langle \mu_2\,|\,H'\,|\,\mu_2\rangle\\
&= -\ \mu_0 B_0(0\ \ 1)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\int_{-L}^{0}\psi_1^*(x)\,\psi_1(x)\,dx = -\frac{\mu_0 B_0}{2}\,,
\end{aligned}$$

và từ định thức $(H' - E^{(1)}I) = 0$ ta được

$$\left(\frac{\mu_0 B_0}{2} - E^{(1)}\right)\left(-\frac{\mu_0 B_0}{2} - E^{(1)}\right) - \frac{\mu_0^2 B_0^2}{4} = 0\,,$$

hay

$$E^{(1)} = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\,\mu_0 B_0\,.$$

Mức năng lượng trạng thái cơ bản như vậy sẽ là

$$E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2} - \frac{1}{\sqrt{2}}\,\mu_0 B_0\,.$$

Từ

$$(H' - E^{(1)}I)\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}.$$

ta thu được hàm sóng trạng thái cơ bản

$$\varphi_0 = au_1 + bu_2 = \psi_1(x) \begin{pmatrix} 1-\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} . \qquad \text{(chưa chuẩn hóa)}$$

(b) Phần không gian của hàm sóng trong vùng I là

$$\psi_{Ik_1} = \begin{cases} A\sin k_1(x+L) + B\cos k_1(x+L), & -L \le x \le 0\,, \\ 0, & x < -L\,. \end{cases}$$

Điều kiện liên tục của hàm sóng dẫn đến $B = 0$. Trong vùng I, spin bị định hướng theo phương z nên các vectơ riêng là $\binom{0}{1}$ đối với $z\downarrow$ và $\binom{1}{0}$ đối với $z\uparrow$. Khi đó

$$\begin{cases} \psi_{I\,k_1 z\downarrow} = \sin k_1(x+L) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & E = \dfrac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \mu_0 B_0\,; \\ \psi_{I\,k_1 z\uparrow} = \sin k_1(x+L) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & E = \dfrac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \mu_0 B_0\,. \end{cases}$$

Tương tự ta thu được các hàm riêng cho vùng II $(0 \le x \le L)$

$$\begin{cases} \psi_{II\,k_2 x\downarrow} = \sin k_2(x-L) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, & E = \dfrac{\hbar^2 k_2^2}{2m} - \mu_0 B_0\,; \\ \psi_{II\,k_2 x\uparrow} = \sin k_2(x-L) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, & E = \dfrac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + \mu_0 B_0\,. \end{cases}$$

(c) Xét trong toàn bộ không gian hàm riêng năng lượng là

$$\psi_E = \begin{cases} A\psi_{I\,k_1 z\downarrow} + B\psi_{I\,k_1' z\uparrow}\,, & -L \le x \le 0\,, \\ C\psi_{II\,k_2 x\downarrow} + D\psi_{II\,k_2' x\uparrow}\,, & 0 \le x \le L\,, \\ 0, & \text{với } x \text{ ở ngoài các khoảng trên.} \end{cases}$$

Khi đó

$H\psi_E =$

$$\begin{cases} \left(\dfrac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \mu_0 B_0\right) A\psi_{Ik_1 z\downarrow} + \left(\dfrac{\hbar^2 k_1'^2}{2m} + \mu_0 B_0\right) B\psi_{Ik_1' z\uparrow}\,, & -L \le x \le 0, \\ \left(\dfrac{\hbar^2 k_2^2}{2m} - \mu_0 B_0\right) C\psi_{IIk_2 x\downarrow} + \left(\dfrac{\hbar^2 k_2'^2}{2m} + \mu_0 B_0\right) D\psi_{IIk_2' x\uparrow}\,, & 0 \le x \le L, \\ 0. & \text{với } x \text{ ở ngoài các khoảng trên.} \end{cases}$$

Từ điều kiện $H\psi_E = E\psi_E$ đối với từng vùng ta có

$$E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \mu_0 B_0 = \frac{\hbar^2 k_1'^2}{2m} + \mu_0 B_0 = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} - \mu_0 B_0$$
$$= \frac{\hbar^2 k_2'^2}{2m} + \mu_0 B_0 ,$$

và như vậy $k_1 = k_2 = k$, $k_1' = k_2' = k'$.

Như vậy, tính liên tục của hàm sóng tại $x = 0$ dẫn đến

$$B \sin k'L = -C \sin kL - D \sin k'L ,$$

$$A \sin kL = C \sin kL - D \sin k'L ,$$

và tính liên tục của đạo hàm hàm sóng tại $x = 0$ dẫn đến

$$Bk' \cos k'L = Ck \cos kL + Dk' \cos k'L ,$$

$$Ak \cos kL = -Ck \cos kL + Dk' \cos k'L .$$

Để giải tìm A, B, C, D đối với nghiệm khác không ta cần

$$\begin{vmatrix} 0 & \sin k'L & \sin kL & \sin k'L \\ \sin kL & 0 & -\sin kL & \sin k'L \\ 0 & k' \cos k'L & -k \cos kL & -k' \cos k'L \\ k \cos kL & 0 & k \cos kL & -k' \cos k'L \end{vmatrix} = 0 ,$$

tức là,

$$k \sin kL \cos k'L - k' \sin k'L \cos kL = 0 .$$

Phương trình này và

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu_0 B_0 = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \mu_0 B_0$$

xác định các trị riêng E.

4015

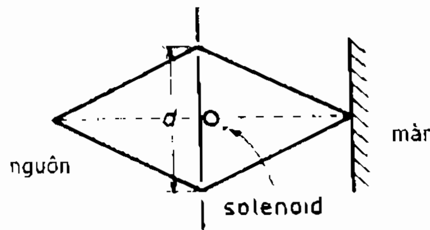
Xét một cuộn soleniod dài vô hạn có dòng điện I chạy qua để tạo ra một từ trường không đổi bên trong cuộn dây đó. Giả thiết trong vùng bên ngoài cuộn dây chuyển động của một hạt điện tích e khối lượng m được mô tả bằng

phương trình Schrödinger. Giả thiết rằng với $I = 0$, nghiệm của phương trình có dạng

$$\psi_0(\mathbf{x}, t) = e^{iE_0 t}\, \psi_0(\mathbf{x}) . \quad (\hbar = 1)$$

(a) Hãy viết và giải phương trình Schrödinger trong vùng bên ngoài cuộn dây trong trường hợp $I \neq 0$.

(b) Xét một thí nghiệm nhiễu xạ hai khe đối với các hạt được mô tả ở trên (xem Hình 4.6). Giả thiết rằng khoảng cách d giữa hai khe là lớn so với đường kính của cuộn dây. Hãy tính độ dịch ΔS của ảnh nhiễu xạ trên màn chắn gây bởi sự có mặt của cuộn soleniod với $I \neq 0$. Giả thiết rằng $l \gg \Delta S$.



Hình 4.6

Gợi ý: Đặt

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_0(\mathbf{x}, t)\, \psi_A(\mathbf{x}) ,$$

ở đây

$$\left(\nabla - i\,\frac{e}{c}\,\mathbf{A}(\mathbf{x})\right) \psi_A(\mathbf{x}) = 0. \quad (\hbar = 1) .$$

(*Chicago*)

Lời giải:

(a) Khi có mặt thế vectơ $\mathbf{A}$, $\mathbf{p} \to \mathbf{p} - e\mathbf{A}/c$. Khi không có trường điện từ thì phương trình Schrödinger có dạng

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi_0(\mathbf{x}, t) = \left[\frac{1}{2m}\,\mathbf{p}^2 + V(\mathbf{x})\right] \psi_0(\mathbf{x}, t) ,$$

cũng như dưới đây ta sẽ sử dụng các đơn vị sao cho $\hbar = 1$. Như vậy, phương trình Schrödinger khi không có trường điện từ có thể thu được (sử dụng lý thuyết liên kết điện từ cực tiểu) dưới dạng như sau

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\mathbf{x}, t) = \left[\frac{1}{2m}\left(-i\nabla - \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2 + V(\mathbf{x})\right] \psi(\mathbf{x}, t) ,$$

ở đây A được cho bởi $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$. Giả sử

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_1(\mathbf{x}, t) \exp\left(i \int^{\mathbf{x}} \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}\right).$$

Khi đó, phương trình trên trở thành

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_1(\mathbf{x}, t) = \left[\frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{x})\right] \psi_1(\mathbf{x}, t),$$

đây là phương trình Schrödinger ứng với từ trường bằng không. Suy ra

$$\psi_1(\mathbf{x}, t) = \psi_0(\mathbf{x}, t) = e^{iE_0 t} \psi_0(\mathbf{x}),$$

và do đó

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{iE_0 t} \psi_0(\mathbf{x}) \exp\left(i \int^{\mathbf{x}} \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}\right).$$

(b) Đây là một bài toán về hiệu ứng Aharonov Bohm. Khi $I = 0$ thì với mọi điểm trên màn chắn biên độ xác suất f bằng $f = f_+ + f_-$, ở đây f_+ và f_- biểu diễn các đóng góp của các khe phía trên và phía dưới tương ứng. Khi có dòng chạy qua, tức là, $I \neq 0$, thì ta có biên độ xác suất $f' = f'_+ + f'_-$ với

$$f'_+ = \exp\left(i \int_{c_+}^{\mathbf{x}} \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}\right) f_+,$$

$$f'_- = \exp\left(i \int_{c_-}^{\mathbf{x}} \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}\right) f_-,$$

ở đây c_+ và c_- kí hiệu cho các đường tích phân tương ứng ở phía trên và phía dưới cuộn solenoid. Như vậy

$$f' = f'_+ + f'_- = \exp\left(i \int_{c_+}^{\mathbf{x}} \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}\right) f_+ + \exp\left(i \int_{c_-}^{\mathbf{x}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}\right) f_-$$
$$\sim \exp\left(i \oint \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}\right) f_- + f_+,$$

sau khi đã chia hai đóng góp này cho thừa số pha chung $\exp(i \int_{c_+}^{\mathbf{x}} \frac{e}{c}\mathbf{A} \cdot d\mathbf{x})$, mà không làm ảnh hưởng gì đến hình ảnh giao thoa. Tích phân đường khép kín lấy ngược chiều kim đồng hồ theo một đường kín bất kì quanh cuộn solenoid dẫn đến

$$\oint \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} = \frac{e}{c} \int \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \frac{e}{c} \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \frac{e\phi}{c},$$

ở đây ϕ là từ thông qua cuộn solenoid.

Như vậy, đưa cuộn solenoid vào dẫn đến một sự lệch pha $e\phi/c$ của biên độ xác suất tại các điểm trên màn chắn gây bởi khe phía dưới.

Sử dụng một phương pháp tương tự như trong thí nghiệm giao thoa của Young trong quang học ta thấy rằng ảnh nhiễu xạ bị dịch đi một khoảng ΔS. Giả thiết $l \gg d$ và $l \gg \Delta S$, ta có

$$\Delta S \cdot \frac{d}{l} \cdot k = \frac{e}{c}\phi ,$$

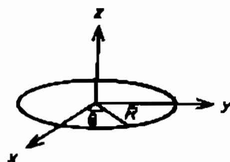
k là số sóng của các hạt, và như vậy

$$\Delta S = \frac{el\,\phi}{cd\,k} = \frac{el\phi}{cd\sqrt{2mE_0}} .$$

Chú ý rằng lời giải này chỉ có ý nghĩa trong trường hợp phi tương đối.

4016

(a) Hãy xác định năng lượng và các hàm riêng năng lượng của một hạt phi tương đối có khối lượng m chuyển động trên một đường tròn bán kính R như chỉ ra trên Hình 4.7?



Hình 4.7

(b) Năng lượng và các hàm riêng năng lượng sẽ như thế nào nếu đường tròn có hai vòng (mỗi vòng có bán kính R) như chỉ ra trên Hình 4.8?



Hình 4.8

(c) Nếu hạt có điện tích q thì các giá trị năng lượng và các hàm riêng năng lượng bằng bao nhiêu khi một cuộn solenoid rất dài chứa một thông lượng từ

chui qua các vòng dây mô tả trong các câu (a) và (b) như chỉ ra trên Hình 4.9? Giả thiết rằng hệ không phát xạ sóng điện từ.

(*Columbia*)



Hình 4.9

Lời giải:

(a) Do

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2mR^2} = -\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{d^2}{d\theta^2}\,.$$

nên ta có phương trình Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\theta^2}\Psi(\theta) = E\Psi(\theta)\,,$$

ở đây

$$I = mR^2\,,$$

hay

$$\frac{d^2\Psi(\theta)}{d\theta^2} + n^2\Psi(\theta) = 0\,,$$

với

$$n^2 = \frac{2IE}{\hbar^2}$$

Như vậy, các nghiệm là

$$\Psi_n(\theta) = A\,e^{in\theta}\,.$$

Để hàm có tính đơn trị ta cần

$$\Psi(\theta + 2\pi) = \Psi(\theta)\,,$$

tức là,

$$n = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots\,.$$

Điều kiện chuẩn hóa dẫn đến

$$A^*A = 1, \quad \text{hay} \quad A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,.$$

Như vậy, các hàm riêng là

$$\Psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{in\theta}, \quad n = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots\ ,$$

và các trị riêng năng lượng là

$$E_n(\theta) = \frac{n^2\hbar^2}{2I}\,.$$

(b) Áp dụng cùng một Hamiltonian như trên và như vậy ta vẫn có cùng một dạng phương trình Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\theta^2}\Psi(\theta) = E\Psi(\theta)\,.$$

Tuy nhiên, tính đơn trị của các nghiệm bây giờ yêu cầu

$$\Psi(\theta + 4\pi) = \Psi(\theta)\,.$$

Các hàm riêng chuẩn hóa và các trị riêng năng lượng bây giờ là

$$\Psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\, e^{i\frac{n}{2}\theta}, \quad n = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots\ ,$$

và

$$E_n(\theta) = \frac{n^2\hbar^2}{8I}\,.$$

(c) Hamiltonian khi có mặt từ trường là

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{x})\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - \frac{iq}{\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{x})\right)^2.$$

Trong vùng hạt di chuyển ta có, $\mathbf{B} = \nabla\times\mathbf{A} = 0$ và ta có thể chọn $\mathbf{A} = \nabla\varphi$. Từ tính đối xứng, ta có $\mathbf{A} = A_\theta \mathbf{e}_\theta$, $A_\theta =$ hằng số. Như vậy

$$\oint \mathbf{A}\cdot d\mathbf{l} = \int_0^{2\pi} A_\theta R d\theta = 2\pi R A_\theta = \phi.$$

Do đó

$$\mathbf{A} = \frac{\phi\mathbf{e}_\theta}{2\pi R} = \nabla(\phi\theta/2\pi)\,,$$

và ta có thể lấy $\varphi = \phi\theta/2\pi$, khi bỏ qua một hằng số pha có thể có trong các hàm sóng. Phương trình Schrödinger là

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - \frac{iq\phi}{2\pi\hbar}\nabla\theta\right)^2\Psi$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\exp\left(i\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\theta\right)\nabla^2\left[\exp\left(-\frac{iq\phi}{2\pi\hbar}\theta\right)\Psi\right] = E\Psi\,.$$

Viết lại dạng hàm sóng

$$\psi'(\theta) = \exp\left(-i\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\theta\right)\Psi(\theta)\,,$$

phương trình trên trở thành

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\theta^2}\psi'(\theta) = E\psi'(\theta)\,,$$

với các nghiệm

$$\psi'(\theta) = \exp\left(\pm i\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}\theta\right).$$

Như vậy

$$\psi(\theta) = c\exp(i\alpha\theta)\psi'(\theta)$$
$$= c\exp\left[i(\alpha \pm \beta)\theta\right],$$

ở đây

$$\alpha = \frac{q\phi}{2\pi\hbar},\quad \beta = \sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}},\quad c = \text{ hằng số}\,.$$

Đối với vòng dây trong câu (a), điều kiện đơn trị

$$\Psi(\theta + 2\pi) = \Psi(\theta)\,,$$

yêu cầu

$$\alpha \pm \beta = n,\quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

tức là,

$$\frac{q\phi}{2\pi\hbar} \pm \sqrt{2IE/\hbar^2} = n\,.$$

Như vậy

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2I}\left(n - \frac{q\phi}{2\pi\hbar}\right)^2,$$

và

$$\psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{in\theta}\,.$$

ở đây

$$n = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots\,.$$

Tương tự đối với vòng dây trong câu (b), ta có

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2I}\left(\frac{n}{2} - \frac{q\phi}{2\pi\hbar}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{8I}\left(n - \frac{q\phi}{\pi\hbar}\right)^2,$$

và

$$\psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\exp\left(i\,\frac{n}{2}\,\theta\right),$$

ở đây

$$n = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots\,.$$

PHẦN V

LÝ THUYẾT NHIỄU LOẠN

5001

(a) Hãy chứng tỏ rằng trong lý thuyết nhiễu loạn trạng thái dừng thông thường, nếu Hamiltonian có thể viết được thành $H = H_0 + H'$ với $H_0\phi_0 = E_0\phi_0$, thì số hạng bổ chính ΔE_0 là

$$\Delta E_0 \approx \langle\phi_0|H'|\phi_0\rangle\,.$$

(b) Đối với một hạt nhân cầu, các nucleon có thể được giả thiết là nằm trong một hố thế cầu bán kính R được biểu diễn bằng $V_{sp} = \begin{cases} 0, & r < R, \\ \infty, & r > R. \end{cases}$

Đối với một hạt nhân bị biến dạng đôi chút, tương ứng ta có thể giả thiết rằng các nucleon nằm trong một hố thế hình elipxôit, có độ sâu vô hạn, được định nghĩa như sau

$$V_{el} = \begin{cases} 0 & \text{bên trong hình elipxôit } \dfrac{x^2+y^2}{b^2} + \dfrac{z^2}{a^2} = 1\,, \\ \infty & \text{bên ngoài elipxôit}\,, \end{cases}$$

trong đó $a \cong R(1 + 2\beta/3)$, $b \cong R(1 - \beta/3)$, và $\beta \ll 1$.

Tính bổ chính của năng lượng ở trạng thái cơ bản E_0 gây bởi tính elipxôit của hạt nhân phi cầu bằng cách tìm ra một H' thích hợp và sử dụng kết quả thu được ở câu (a). Gợi ý: Cố gắng tìm một phép biến đổi các biến để làm cho giếng thế có dạng cầu.

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Giả thiết rằng H' rất nhỏ so với H_0 sao cho hàm sóng Ψ có thể được khai triển dưới dạng

$$\Psi = |\phi_0\rangle + \lambda_1|\phi_1\rangle + \cdots + \lambda_n|\phi_n\rangle + \cdots\,,$$

trong đó $\lambda_1 \cdots \lambda_n \cdots$ là các tham số có giá trị nhỏ. Phương trình Schrödinger lúc này có dạng

$$\begin{aligned}(H' + H_0)\,(|\phi_0\rangle + \lambda_1|\phi_1\rangle + \cdots + \lambda_n|\phi_n\rangle + \cdots) \\ = (E_0 + \Delta E_0)\,(|\phi_0\rangle + \lambda_1|\phi_1\rangle + \cdots + \lambda_n|\phi_n\rangle + \cdots)\,.\end{aligned}$$

Chỉ xét số hạng bổ chính đầu tiên, ta có

$$H'|\phi_0\rangle + H_0(\lambda_1|\phi_1\rangle + \cdots + \lambda_n|\phi_n\rangle + \cdots)$$
$$= \Delta E_0|\phi_0\rangle + E_0(\lambda_1|\phi_1\rangle + \cdots + \lambda_n|\phi_n\rangle + \cdots).$$

Nhân hai vế của phương trình với $\langle\phi_0|$ và lưu ý tính trực giao của các hàm riêng ta thu được

$$\Delta E_0 = \langle\phi_0|H'|\phi_0\rangle.$$

(b) Đối với trạng thái dừng,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V.$$

trong đó

$$V = \begin{cases} 0 & \text{bên trong hình elipxôit } \dfrac{x^2+y^2}{b^2} + \dfrac{z^2}{a^2} = 1, \\ \infty & \text{bên ngoài elipxôit.} \end{cases}$$

Thay thế các biến x, y, z lần lượt bằng $\frac{b}{R}\xi$, $\frac{b}{R}\eta$, $\frac{a}{R}\zeta$ ta có thể viết phương trình cho elipxôit dưới dạng $\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2 = R^2$ và

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{R^2}{b^2}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{R^2}{b^2}\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} + \frac{R^2}{a^2}\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}\right)$$
$$\approx -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\eta^2} + \frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}\right)$$
$$-\frac{\hbar^2\beta}{3m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\eta^2} - 2\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}\right)$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 - \frac{\hbar^2\beta}{3m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\eta^2} - 2\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}\right).$$

Số hạng thứ hai của H có thể được xem như là một nhiễu loạn do $\beta \ll 1$. Như vậy

$$\Delta E_0 = \langle\phi_0|H'|\phi_0\rangle = \langle\phi_0| -\frac{\hbar^2\beta}{3m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\eta^2} - 2\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}\right)|\phi_0\rangle.$$

trong đó ϕ_0 là hàm sóng ở trạng thái cơ bản đối với giếng thế cầu,

$$\phi_0 = \sqrt{\frac{2}{R}} \frac{\sin \frac{\pi r}{R}}{r}, \quad r^2 = \xi^2 + \eta^2 + \zeta^2 .$$

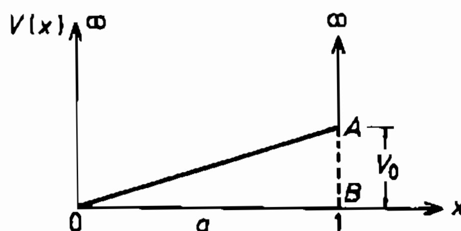
Do ϕ_0 có tính đối xứng cầu,

$$\langle \phi_0 | \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} | \phi_0 \rangle ,$$

nên $\Delta E_0 = 0$.

5002

Sử dụng lý thuyết nhiễu loạn bậc một, hãy tính năng lượng của ba trạng thái đầu tiên cho một giếng thế vuông góc sâu vô hạn có độ rộng a, trong đó đoạn AB bị cắt bỏ. (Lưu ý rằng OA là một đoạn thẳng).



Hình 5.1

(*Buffalo*)

Lời giải:

Việc thay đổi Hamiltonian, $H' = \frac{V_0}{a} x$ $(0 \leq x \leq a)$, có thể được coi như là một nhiễu loạn. Các hàm riêng không nhiễu loạn và các trị riêng tương ứng của ba trạng thái đầu tiên là

$$\Psi_1^0 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi}{a} x, \quad E_1^0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} ;$$

$$\Psi_2^0 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi}{a} x, \quad E_2^0 = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{\mu a^2} ;$$

$$\Psi_3^0 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{3\pi}{a} x, \quad E_3^0 = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} .$$

Các bổ chính năng lượng bậc nhất là

$$\langle\psi_1^0|H'|\psi_1^0\rangle = \frac{V_0}{2},$$

$$\langle\psi_2^0|H'|\psi_2^0\rangle = \frac{V_0}{2},$$

$$\langle\psi_3^0|H'|\psi_3^0\rangle = \frac{V_0}{2},$$

và năng lượng của ba trạng thái đầu tiên là

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} + \frac{V_0}{2}, \quad \frac{2\pi^2\hbar^2}{\mu a^2} + \frac{V_0}{2}, \quad \frac{9\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} + \frac{V_0}{2}.$$

5003

Một hạt có khối lượng m chuyển động một chiều trong một thế năng dao động tử $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Trong giới hạn phi tương đối tính, ở đó động năng T và xung lượng p được liên hệ với nhau bởi biểu thức $T = p^2/2m$, thì năng lượng trạng thái cơ bản được biết có giá trị bằng $\frac{1}{2}\hbar\omega$.

Tìm các bổ chính tương đối tính trong hệ thức giữa T và p và tính độ dịch năng lượng của trạng thái cơ bản ΔE tới bậc $\frac{1}{c^2}$ (c = vận tốc ánh sáng).

(*Buffalo*)

Lời giải:

Trong chuyển động tương đối tính, động năng T là

$$\begin{aligned} T \equiv E - mc^2 &= \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} - mc^2 \\ &= mc^2\left(1 + \frac{p^2}{m^2c^2}\right)^{\frac{1}{2}} - mc^2 \\ &\approx mc^2\left(1 + \frac{p^2}{2m^2c^2} - \frac{p^4}{8m^4c^4}\right) - mc^2 \\ &= \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} \end{aligned}$$

tới bậc $\frac{1}{c^2}$. Số hạng $\frac{p^4}{8m^3c^2}$ có thể được xem như là một nhiễu loạn. Như vậy, độ

dịch năng lượng của trạng thái cơ bản là

$$\begin{aligned}\Delta E &= \left\langle -\frac{p^4}{8m^3c^2}\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^* \left(\frac{-\hat{p}^4}{8m^3c^2}\right) \phi_0 \, dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{mw}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{mw}{2\hbar}x^2\right] \\ &\quad \times \left(-\frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\frac{\partial^4}{\partial x^4}\right) \left(\frac{mw}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{mw}{2\hbar}x^2\right] dx \\ &= -\frac{15}{32}\frac{(\hbar w)^2}{mc^2}\,.\end{aligned}$$

5004

Một electron dịch chuyển trong một trường Coulomb có tâm tại gốc tọa độ. Bỏ qua các bổ chính spin và tương đối tính mức kích thích đầu tiên ($n = 2$) đã được biết là có suy biến bậc 4: $l = 0$, $m_l = 0$; $l = 1$, $m_l = 1, 0, -1$. Xem xét điều gì sẽ xảy ra với mức năng lượng này khi có mặt của một thế phụ không xuyên tâm $V_{\text{nhiễu loạn}}$: $V_{\text{nhiễu loạn}} = f(r)xy$, trong đó $f(r)$ là một hàm xuyên tâm nào đó suy giảm đủ nhanh khi $r \to \infty$. Nhiễu loạn này được xét theo gần đúng bậc nhất. Tới bậc này mức suy biến ban đầu $n = 2$ tách thành vài mức có năng lượng khác nhau, mỗi mức được đặc trưng bởi một độ dịch năng lượng ΔE và bậc suy biến (có thể là suy biến đơn, tức là không suy biến, có thể là suy biến bội).

(a) Có bao nhiêu mức năng lượng tách biệt?

(b) Bậc suy biến của từng mức là bao nhiêu?

(c) Với một độ dịch năng lượng cho trước, gọi nó là A ($A > 0$), đối với một trong các mức năng lượng đó thì các độ dịch của tất cả các mức còn lại là bao nhiêu?

(Princeton)

Lời giải:

Với $V = f(r)xy = f(r)r^2 \sin^2\theta \sin\varphi \cos\varphi$ được coi như là một nhiễu loạn,

các hàm sóng không nhiễu loạn cho mức năng lượng $l = 2$ là

$$l = 0, \quad m_l = 0, \quad R_{20}(r)Y_{00},$$

$$l = 1, \quad m_l = 1, \quad R_{21}(r)Y_{11},$$

$$l = 1, \quad m_l = 0, \quad R_{21}(r)Y_{10},$$

$$l = 1, \quad m_l = -1, \quad R_{21}(r)Y_{1,-1}.$$

Do tất cả chúng tương ứng với cùng một năng lượng, tức là xảy ra suy biến nên trước tiên ta phải tính toán

$$\begin{aligned} H'_{l'm'lm} &= \langle l'm'|V|lm\rangle \\ &= \int R_{2l'}(r)R_{2l}(r)r^2 f(r)\, Y^*_{l'm'} \sin^2\theta \sin\varphi \cos\varphi Y_{lm}\, dV . \end{aligned}$$

Các hàm cầu cần thiết là

$$Y_{00} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}, \qquad Y_{11} = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta e^{i\varphi},$$

$$Y_{10} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\theta, \qquad Y_{1,-1} = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta e^{-i\varphi}.$$

Xét thừa số chứa φ trong các phần tử ma trận $H_{l'm'lm}$ ta thấy rằng các phần tử ma trận như vậy có một trong các thừa số sau

$$\int_0^{2\pi} \sin\varphi\cos\varphi d\varphi = 0, \qquad \int_0^{2\pi} e^{\pm i2\varphi} \sin\varphi\cos\varphi d\varphi = 0,$$

ngoại trừ $H'_{1,-1,1,1}$ và $H'_{1,1,1,-1}$, có các giá trị khác không

$$\begin{aligned} H'_{1,-1,1,1} = \frac{3}{8\pi} &\int [R_{21}(r)]^2 r^4 f(r)\, dr \int_0^{\pi} \sin^5\theta d\theta \\ &\times \int_0^{2\pi} \sin\varphi\cos\varphi e^{-2i\varphi} d\varphi = iA, \end{aligned}$$

$$H'_{1,1,1,-1} = -iA, \quad \text{with } A = \frac{1}{5}\int [R(r)]^2 r^4 f(r)\, dr .$$

Khi đó, ta tính phương trình trường kì

$$\left| \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & iA \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -iA & 0 & 0 \end{pmatrix} - \Delta E \mathbf{I} \right| = \begin{vmatrix} \Delta E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta E & 0 & iA \\ 0 & 0 & \Delta E & 0 \\ 0 & -iA & 0 & \Delta E \end{vmatrix} = 0,$$

nghiệm của nó là $\Delta E = 0$, $\Delta E = 0$, $\Delta E = A$, $\Delta E = -A$.

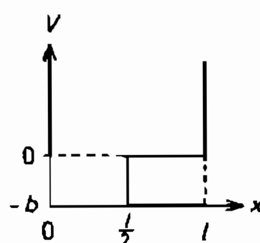
Ta thấy khi có nhiễu loạn sẽ sinh ra ba mức năng lượng khác nhau với $n = 2$. Các độ dịch năng lượng và các mức suy biến sẽ là

$$\Delta E = \begin{cases} A, & \text{suy biến bậc một}, \\ -A, & \text{suy biến bậc một}, \\ 0, & \text{suy biến bậc hai}. \end{cases}$$

Do đó, tồn tại ba mức năng lượng phân biệt với $n = 2$.

5005

Một hạt chuyển động trong một hộp một chiều với một vùng thế nhỏ trũng xuống (Hình 5.2)



Hình 5.2

$$V = \infty \quad \text{với } x < 0 \; v \; x > l\,,$$

$$V = -b \quad \text{với } 0 < x < (1/2)l\,,$$

$$V = 0 \quad \text{với } (1/2)l < x < l\,.$$

Xét chỗ trũng thế năng như một nhiễu loạn đối với hộp cứng thông thường ($V = \infty$ với $x < 0$ và $x > l$, $V = 0$ với $0 < x < l$). Hãy tìm năng lượng bậc nhất của trạng thái cơ bản.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Đối với hộp cứng thông thường, năng lượng và hàm sóng của trạng thái cơ

bản tương ứng là

$$E^{(0)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}, \quad \psi^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{\pi x}{l}.$$

Nhiễu loạn là $H^{(1)} = -b$, $0 \le x \le \frac{l}{2}$. Như vậy, bổ chính năng lượng của nhiễu loạn bậc một là

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \int_0^{\frac{l}{2}} \phi^{(0)*}(x)(-b)\varphi^{(0)}(x)dx \\ &= \int_0^{\frac{l}{2}} \frac{2}{l}\sin^2\left(\frac{\pi x}{l}\right)(-b)\,dx \\ &= -\frac{b}{l}\int_0^{\frac{l}{2}}\left(1-\cos\frac{2\pi x}{l}\right)dx = -\frac{b}{2}. \end{aligned}$$

Và năng lượng của trạng thái cơ bản với bổ chính nhiễu loạn bậc nhất là

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2} - \frac{b}{2}.$$

5006

Một giếng thế vuông góc một chiều sâu vô hạn có thành tại $x = 0$ và $x = L$. Hai thế nhiễu loạn nhỏ có độ rộng a và độ cao V được định vị tại $x = L/4$ và $x = (3/4)L$, trong đó a là nhỏ (chẳng hạn ($a \ll L/100$) như chỉ ra trên Hình 5.3. Sử dụng các phương pháp nhiễu loạn, đánh giá hiệu các độ dịch năng lượng giữa các mức năng lượng $n = 2$ và $n = 4$ gây ra bởi các thế nhiễu loạn đó.

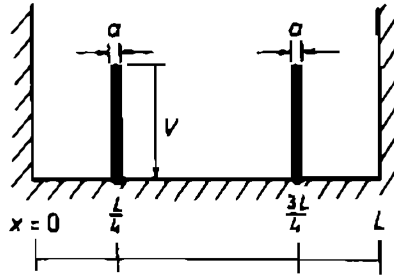
(*Wisconsin*)

Lời giải:

Các mức năng lượng và các hàm sóng của một giếng thế vuông góc một chiều sâu vô hạn tương ứng là

$$E_n^{(0)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu L^2}n^2,$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x, \quad n = 1, 2, \dots.$$



Hình 5.3

Độ dịch của mức năng lượng n, $E_n^{(1)} = H'_{nn}$, tương ứng với nhiễu loạn bậc nhất được tính bởi

$$H'_{nn} = \int_{L/4-a/2}^{L/4+a/2} V \cdot \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi n}{L} x\right) dx + \int_{3L/4-a/2}^{3L/4+a/2} V \cdot \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi n}{L} x\right) dx .$$

Do $a \ll L/100$, ta có thể áp dụng định lý trung bình cho các tích phân và thu được

$$\begin{aligned} H'_{nn} &= \frac{2Va}{L} \left[\sin^2\left(\frac{\pi n}{4} \cdot \frac{L}{4}\right) + \sin^2\left(\frac{\pi n}{L} \cdot \frac{3L}{4}\right)\right] \\ &= \frac{2Va}{L} \left(\sin^2 \frac{\pi n}{4} + \sin^2 \frac{3\pi n}{4}\right) . \end{aligned}$$

Bởi vậy, sự thay đổi hiệu năng giữa các mức $n = 2$ và $n = 4$ là

$$\begin{aligned} E_2^{(1)} - E_4^{(1)} &= \frac{2Va}{L} \left(\sin^2 \frac{\pi}{2} + \sin^2 \frac{3\pi}{2} - \sin^2 \pi - \sin^2 3\pi\right) \\ &= \frac{4Va}{L} . \end{aligned}$$

5007

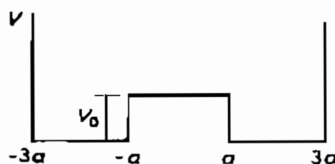
Một hạt có khối lượng m chuyển động trong một hộp thế một chiều

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{với } |x| > 3|a|, \\ 0 & \text{với } a < x < 3a, \\ 0 & \text{với } -3a < x < -a, \\ V_0 & \text{với } -a < x < a, \end{cases}$$

như chỉ ra trên Hình 5.4.

Coi phần V_0 như là một nhiễu loạn trên một hộp phẳng ($V = 0$ với $-3a < x < 3a$, $V = \infty$ với $|x| > 3|a|$) có chiều dài $6a$. Sử dụng phương pháp nhiễu loạn bậc nhất để tính năng lượng của trạng thái cơ bản.

(Wlàconsin)



Hình 5.4

Lời giải:

Các năng lượng và các hàm sóng của một hạt trong một hộp phẳng có chiều rộng $6a$ là

$$E^{(0)} = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{72ma^2}, \quad n = 1, 2, \ldots,$$

$$\psi^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{1}{3a}} \cos\frac{n\pi x}{6a}, \quad n = \text{số nguyên lẻ},$$

$$\psi^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{1}{3a}} \sin\frac{n\pi x}{6a}, \quad n = \text{số nguyên chẵn}.$$

Riêng đối với trạng thái cơ bản, ta có

$$\psi_1^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{1}{3a}} \cos\frac{\pi x}{6a}$$

$$E_1^{(0)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{72ma^2}.$$

Bổ chính năng lượng theo nhiễu loạn bậc nhất được biểu diễn bằng

$$E^{(1)} = (\psi_1^{(0)}(x), \quad \hat{V}\psi_1^{(0)}(x)),$$

trong đó $\hat{V} = V_0$ với $-a \le x \le a$. Như vậy

$$E^{(1)} = \int_{-0}^{a} \frac{V_0}{3a} \cos^2\left(\frac{\pi x}{6a}\right) dx = V_0 \left(\frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi}\right).$$

Suy ra năng lượng ở trạng thái cơ bản tính theo nhiễu loạn bậc nhất bằng

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{72ma^2} + V_0 \left(\frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi}\right).$$

5008

Một dao động tử điều hòa một chiều chịu một thế nhiễu loạn nhỏ $\delta V(x)$, tác động tạo thành một chỗ lõm tại tâm của thế V. Như vậy

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{\lambda}{x^2 + a^2} = \frac{P^2}{2m} + V + \delta V.$$

Hãy tính bổ chính cho năng lượng trạng thái cơ bản của dao động tử theo bậc nhất của λ trong hai trường hợp

(a) $a \ll \sqrt{\hbar/m\omega}$,

(b) $a \gg \sqrt{\hbar/m\omega}$.

Gợi ý: Hàm sóng trạng thái cơ bản được chuẩn hóa của một dao động tử điều hòa là

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp(-m\omega x^2/2\hbar),$$

và

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + a^2} = \frac{\pi}{a}.$$

(Columbia)

Lời giải:

Bổ chính năng lượng cho trạng thái cơ bản theo nhiễu loạn bậc nhất là

$$\Delta E = \langle 0|\delta V|0\rangle = \lambda \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-m\omega x^2/\hbar}}{x^2 + a^2} dx.$$

(a) $a \ll \sqrt{\hbar/m\omega}$,

$$\Delta E = \lambda \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-m\omega a^2 y^2/\hbar}}{a(y^2+1)} dy$$

$$\approx \frac{\lambda}{a} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{y^2+1} = \frac{\lambda}{a}\sqrt{\frac{m\omega\pi}{\hbar}}.$$

(b) $a \gg \sqrt{\hbar/m\omega}$,

$$\Delta E = \frac{\lambda}{a} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-m\omega a^2 y^2/\hbar}}{y^2+1} dy$$

$$\approx \frac{\lambda}{a} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-m\omega a^2 y^2/\hbar} dy = \lambda/a^2 .$$

5009

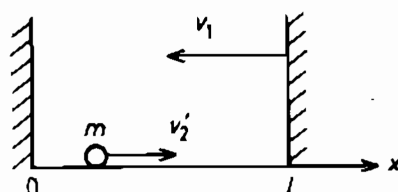
Một quả bóng đàn hồi lý tưởng nảy qua lại giữa hai bức tường song song.

(a) Sử dụng cơ học cổ điển, hãy tính sự thay đổi năng lượng trên một đơn vị thời gian của quả bóng khi hai bức tường bị dịch đều từ từ về gần nhau hơn.

(b) Hãy chỉ ra rằng sự thay đổi năng lượng này giống như kết quả của cơ học lượng tử nếu số lượng tử của quả bóng không thay đổi.

(c) Nếu quả bóng ở trạng thái lượng tử $n = 1$ thì dưới các điều kiện nào của bức tường chuyển động quả bóng vẫn giữ nguyên trạng thái của nó?

(*Chicago*)



Hình 5.5

Lời giải:

(a) Trong cơ học cổ điển, năng lượng của quả bóng là

$$E = \frac{p^2}{2m},$$

do đó $\frac{dE}{dt} = \frac{p}{m}\frac{dp}{dt}$.

Tại một thời điểm nào đó, hai bức tường cách nhau một khoảng L và quả bóng chuyển động về bên phải với tốc độ v_2'. Bởi vì va chạm là đàn hồi tuyệt đối nên tốc độ của quả bóng so với bức tường bên phải trước và sau va chạm vẫn giữ nguyên

$$v_2' + v_1 = v_2 + (-v_1)\,,$$

trong đó v_2 là tốc độ của quả bóng sau khi va chạm, còn v_1 là vận tốc của bức tường bên phải. Như vậy,

$$v_2' - v_2 = -2v_1\,,$$

$$\Delta p = m(v_2' - v_2) = -2mv_1\,.$$

$$dE/dt = \frac{p}{m}\frac{dp}{dt} \approx \frac{p}{m}\frac{\Delta p}{\Delta t} = -\frac{p}{m}2mv_1 \cdot \frac{v_2}{2L} = -\frac{pv_1v_2}{L}\,.$$

trong đó $\Delta t = \frac{2L}{v_2}$ là khoảng thời gian giữa hai lần va chạm. Do bức tường bên phải chuyển động rất chậm nên

$$dE/dt = -\frac{pv_2}{L}v_1 = -\frac{p}{L}\cdot\frac{p}{m}\cdot\frac{dL}{dt}$$
$$= -\frac{2}{L}\cdot\frac{p^2}{2m}\frac{dL}{dt} = -\frac{2E}{L}\frac{dL}{dt}\,,$$

là tốc độ thay đổi năng lượng của quả bóng theo cơ học cổ điển.

(b) Do chuyển động của bức tường bên phải là rất chậm nên bài toán có thể được xét dưới dạng bài toán nhiễu loạn. Nếu chuyển động của bức tường có thể được bỏ qua thì ta có

$$E_n = \frac{n\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,.$$

Nếu n không đổi thì,

$$dE_n/dt = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m}(-2)\frac{1}{L^3}\frac{dL}{dt} = -\frac{2E_n}{L}dL/dt\,,$$

giống như kết quả của cơ học cổ điển.

(c) Nếu sự thay đổi năng lượng trong khi xảy ra một va chạm là rất nhỏ so với $E_2 - E_1$, thì quả bóng có thể vẫn ở trạng thái $n = 1$ (tương tự như các quá trình đoạn nhiệt trong nhiệt động học). Nói chính xác hơn do

$$E = \frac{p^2}{2m}\,,$$

nên ta có

$$\Delta E = \frac{p}{m}\Delta p = -\sqrt{\frac{2E}{m}} \cdot 2mv_1 = -2\sqrt{2mE}\, v_1 \,.$$

Điều kiện

$$E_2 - E_1 \gg |\Delta E|$$

như vậy dẫn đến

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(2^2 - 1^2) \gg 2\sqrt{2m\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}}\, |v_1| \,,$$

hay

$$|v_1| \ll \frac{3\pi\hbar}{4mL} \,.$$

Điều này có nghĩa là tốc độ của bức tường bên phải phải nhỏ hơn nhiều $\frac{3\pi\hbar}{4mL}$.

5010

Xét một electron trong hộp một chiều có chiều dài 1 Å.

(a) Hãy tìm 4 hàm sóng đầu tiên (các hàm sóng chuẩn hóa) và vẽ dạng đồ thị của chúng.

(b) Tính 4 mức năng lượng tương ứng và vẽ sơ đồ mức năng lượng.

(c) Tại $t = 0$, hạt ở trạng thái $n = 1$. Tại $t = 0$, một giếng thế năng dạng chữ nhật $V_0 = -10^4$ eV, có tâm tại a /2 và độ rộng 10^{-12} cm, bất ngờ được đưa thêm vào giếng thế ban đầu và duy trì trong vòng 5×10^{-18} s, sau đó bị ngắt đi. Sau khi mất đi sự nhiễu loạn thì xác suất để tìm thấy hệ tại từng trạng thái $n = 2, n = 3$ và $n = 4$ là bao nhiêu? (Chiều cao và chiều rộng của giếng thế là đặc trưng cho một nơtron tương tác với một electron).

Chú ý: Bạn có thể sử dụng đồ thị để đánh giá các phần tử của ma trận liên quan.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Hộp thế có thể được biểu diễn bởi

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le a, \\ \infty, & \text{các giá trị còn lại,} \end{cases}$$

trong đó $a = 1$ Å là chiều dài của hộp. Phương trình Schrödinger cho electron là

$$\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0, \quad x \in [0, a],$$

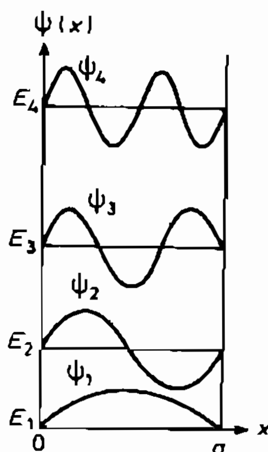
tuân theo điều kiện

$$\psi(x) = 0, \quad x \bar{\in} [0, a].$$

Do $E = T + V$ dương, các nghiệm phải có dạng hình sin với các nút tại $x = 0$ và $x = a$. Như vậy, các nghiệm chuẩn hóa là

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{n\pi x}{a}, \quad x \in [0, a]. \quad n = 1, 2, \ldots .$$

Bốn hàm sóng đầu tiên trong $[0, a]$ được mô tả trên Hình 5.6:



Hình 5.6

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{\pi x}{a},$$

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{2\pi x}{a},$$

$$\psi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{3\pi x}{a},$$

$$\psi_4(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{4\pi x}{a}.$$

(b) Thay thế ψ_n vào phương trình Schrödinger dẫn đến

$$\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

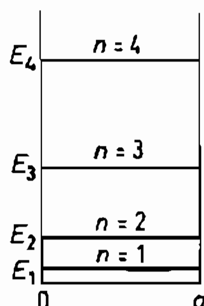
hay

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \ldots$$

Bốn mức năng lượng đầu tiên là

$$E_1 = \hbar^2\pi^2/2ma^2 = 0,602 \times 10^{-10}\,\text{erg} = 37,4 \text{ eV}.$$
$$E_2 = 4E_1 = 2,408 \times 10^{-10}\,\text{erg} = 149,6 \text{ eV}$$
$$E_3 = 9E_1 = 5,418 \times 10^{-10}\,\text{erg} = 336,6 \text{ eV}$$
$$E_4 = 16E_1 = 9,632 \times 10^{-10}\,\text{erg} = 598,4 \text{ eV}.$$

Các mức này được chỉ ra trên Hình 5.7.



Hình 5.7

(c) Xác suất để tìm thấy hệ ở trạng thái n sau nhiễu loạn là

$$P_n = \left|H'_{n1}\frac{1-e^{i\omega_{n1}t_0}}{\hbar\omega_{n1}}\right|^2 = \left[\frac{2H'_{n1}}{\hbar\omega_{n1}}\sin\left(\frac{\omega_{n1}t_0}{2}\right)\right]^2,$$

trong đó

$$\omega_{n1} = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_1),$$

$$H'_{n1} = \int_{\frac{a}{2}-b}^{\frac{a}{2}+b} \psi_n^* V_0 \psi_1 dx = \frac{2V_0}{a}\int_{\frac{a}{2}-b}^{\frac{a}{2}+b} \sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{\pi}{a}\cdot dx.$$

Do $b \ll a$, theo định lý giá trị trung bình của tích phân với $x \simeq \frac{a}{2}$, $dx \equiv 2b$ và ta có

$$H'_{n1} \approx \frac{4bV_0}{a} \sin \frac{n\pi}{2} \,.$$

Như vậy $H_{21} = 0$, $H_{41} = 0$, $H_{31} = \frac{2\times 10^{-12}\times 10^4}{10^{-8}} = 2$ eV. Như vậy,

$$P_2 = P_4 = 0 \,,$$

$$P_3 = \frac{16}{\hbar^2 \omega_{31}^2} \sin^2 \left(\frac{1}{2} \omega_{31} t_0 \right) = 1,45 \times 10^{-4} \,,$$

với

$$\hbar\omega_{31} = 336,6 - 37,4 = 299,2 \text{ eV} \,,$$
$$t_0 = 5 \times 10^{-18} \text{ s} \,.$$

5011

Một hạt tích điện bị giam trong một thế dao động tử điều hòa $V = \frac{1}{2} kx^2$. Hệ được đặt trong một điện trường ngoài E không đổi theo thời gian và không gian. Hãy tính độ dịch năng lượng của trạng thái cơ bản tới bậc E^2.

(*Columbia*)

Lời giải:

Chọn hướng của điện trường theo phương x. Hamiltonian của hệ là

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 - qEx = \hat{H}_0 + \hat{H}' \,,$$

trong đó $\hat{H}' = -qEx$ được coi như là một nhiễu loạn.

Hàm sóng ở trạng thái cơ bản của một dao động tử điều hòa là

$$\psi_{(}x) \equiv \langle x|0\rangle = \sqrt{\frac{a}{\pi^{1/2}}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2 \right) \,,$$

trong đó

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \,, \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \,.$$

Do ψ_0 là một hàm chẵn nên bổ chính bậc một $\langle 0|H'|0\rangle = 0$ và ta phải tính đến bậc hai. Đối với dao động tử điều hòa ta có

$$\langle n'|x|n\rangle = \frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n'}{2}}\,\delta_{n,n'-1} + \sqrt{\frac{n'+1}{2}}\,\delta_{n,n'+1}\right],$$

và như vậy

$$H'_{0,n} = -qE\langle 0|x|n\rangle = -(qE/\sqrt{2}\alpha)\,\delta_{n,1}\,.$$

Suy ra bổ chính năng lượng cho trạng thái cơ bản tới bậc E^2 là

$$\Delta E_0^{(2)} = \sum_n{}' \frac{|H'_{0,n}|^2}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}} = \sum_n{}' \frac{\frac{q^2E^2}{2\alpha^2}\,\delta_{n,1}}{-n\hbar\omega}$$
$$= -\frac{q^2E^2}{2\hbar\omega\alpha^2} = -\frac{q^2E^2}{2m\omega^2}\,.$$

trong đó kí hiệu tổng $\sum_n'$ loại trừ $n = 0$.

5012

Đối với một dao động tử điều hòa một chiều, nếu đưa vào tọa độ không thứ nguyên $y = x(m\omega_0/\hbar)^{1/2}$ và biến năng lượng $\varepsilon_n = 2E_n/\hbar\omega_0$ ta sẽ nhận được một phương trình Schrödinger với toán tử động năng $T = -\frac{d^2}{dy^2}$ và thế năng $V = y^2$.

(a) Sử dụng hệ quả rằng chỉ có duy nhất một phần tử ma trận lưỡng cực khác không là $\langle n+1|y|n\rangle = \sqrt{\frac{n+1}{2}}$ (và liên hợp Hermite của nó), hãy tính tất cả các phần tử ma trận khác không của y^3 liên hệ với trạng thái cơ bản $|0\rangle$.

(b) Dao động tử bị nhiễu loạn bởi một thế $V' = \alpha y^3$. Hãy tìm bổ chính cho năng lượng trạng thái cơ bản ở bậc khác không thấp nhất. (Trường hợp bạn không trả lời được hoàn toàn câu (a) hãy đưa ra kết quả dưới dạng các phần tử ma trận được định nghĩa rõ ràng, v.v.)

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Do

$$\langle m|y|n\rangle = \sqrt{\frac{m}{2}}\,\delta_{n,m-1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\,\delta_{m,n-1}\,,$$

nên các phần tử ma trận khác không liên quan với trạng thái $|0\rangle$,

$$\langle m|y^3|0\rangle = \sum_{k,l} \langle m|y|k\rangle \langle k|y|l\rangle \langle l|y|0\rangle ,$$

đó là các phần tử với $m = 3$, $k = 2$, $l = 1$, và với $m = 1$, và $k = 0$, $l = 1$, hoặc $k = 2$, $l = 1$, có nghĩa là

$$\frac{\sqrt{3}}{2}\,\delta_{m,3} \quad \text{và} \quad \frac{3}{2\sqrt{2}}\,\delta_{m,1} .$$

(b) Do ψ_0 là một hàm chẵn do đó, $\langle 0|y^3|0\rangle = 0$, hay nói cách khác bổ chính năng lượng $\langle 0|\alpha y^3|0\rangle$ bằng không, và ta phải tính toán bổ chính năng lượng bậc hai

$$\Delta E_2 = \sum_{n\neq 0} \frac{|\langle 0|\alpha y^3|n\rangle|^2}{1-\varepsilon_n} = |\alpha|^2 \left(\frac{|\langle 0|y^3|1\rangle|^2}{1-\varepsilon_1} + \frac{|\langle 0|y^3|3\rangle}{1-\varepsilon_3} \right) .$$

Do

$$\varepsilon_n = \frac{2E_n}{\hbar\omega_0} = 2n+1 ,$$

$$\Delta E = |\alpha|^2 \left(\frac{|\langle 0|y^3|1\rangle|^2}{-2} + \frac{|\langle 0|y^3|3\rangle|^2}{-6} \right) = -\frac{11}{16}\,|\alpha|^2 .$$

5013

Xét một dao động tử điều hòa một chiều có tần số ω_0. Kí hiệu các trị riêng năng lượng bằng n, bắt đầu từ $n = 0$ ứng với giá trị năng lượng thấp nhất. Một thế nhiễu loạn không phụ thuộc thời gian $\mathcal{H} = V(x)$ được thêm vào thế năng dao động tử ban đầu. Thay vì đưa ra dạng của thế nhiễu loạn $V(x)$, ta sẽ chỉ ra tường minh các phần tử ma trận của nó được tính toán trong biểu diễn của các trạng thái riêng không nhiễu loạn. Các phần tử ma trận $\mathcal{H}$ sẽ bằng không trừ khi m và n là chẵn. Một phần của ma trận đó được chỉ ra dưới đây trong đó ε là một hằng số nhỏ và không có thứ nguyên. [Chú ý rằng các chỉ số của ma trận này chạy từ $n = 0$ đến 4].

$$\varepsilon\hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\sqrt{1/2} & 0 & \sqrt{3/8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{1/2} & 0 & 1/2 & 0 & -\sqrt{3/16} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3/8} & 0 & -\sqrt{3/16} & 0 & 3/8 \end{pmatrix}$$

(a) Hãy tìm các năng lượng mới của năm mức năng lượng thấp nhất tính đến bậc nhất trong lý thuyết nhiễu loạn.

(b) Tìm các năng lượng mới cho $n = 0$ và 1 tới bậc hai trong lý thuyết nhiễu loạn.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Các mức năng lượng tới gần đúng bậc nhất trong lý thuyết nhiễu loạn là

$$E'_n = E_n + H'_{nn} \, .$$

trong đó $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$, $H'_{nn} = \langle n|\mathcal{H}|n\rangle$. Như vậy, năng lượng của năm mức năng lượng đầu tiên là

$$E'_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + \varepsilon\hbar\omega_0 = \left(\frac{1}{2} + \varepsilon\right)\hbar\omega_0 \, ,$$

$$E'_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0 \, ,$$

$$E'_2 = \left(\frac{5}{2} + \frac{1}{2}\varepsilon\right)\hbar\omega_0 \, ,$$

$$E'_3 = \frac{7}{2}\hbar\omega_0 \, ,$$

$$E'_4 = \left(\frac{9}{2} + \frac{3}{8}\varepsilon\right)\hbar\omega_0 \, .$$

(b) Các năng lượng tương ứng với $n = 0$ và 1 tính tới gần đúng bậc hai là

$$\begin{aligned} E''_0 &= E_0 + H'_{00} + \sum_{k\neq 0} \frac{|H_{k0}|^2}{E_0 - E_k} \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + \varepsilon\hbar\omega_0 + \sum_{k\neq 0} \frac{1}{-k\hbar\omega_0}|H'_{k0}|^2 \\ &= \hbar\omega_0\left[\frac{1}{2} + \varepsilon - \varepsilon^2\left(\frac{1}{4} + \frac{3}{32} + \cdots\right)\right] , \end{aligned}$$

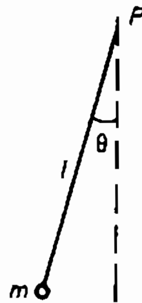
$$E_1'' = E_1 + H'_{11} + \sum_{k\neq 0} \frac{|H'_{k1}|^2}{E_1 - E_k}$$

$$= \frac{3}{2}\hbar\omega_0 + 0 + \sum_{k\neq 1} \frac{1}{(1-k)\hbar\omega_0} |H'_{k1}|^2$$

$$= \hbar\omega_0 \left(\frac{3}{2} + 0 + 0\right) = \frac{3}{2}\hbar\omega_0 .$$

5014

Một chất điểm khối lượng m được treo bằng một sợi dây có chiều dài l và không có khối lượng vào một trục P và dao động trong mặt phẳng thẳng đứng dưới tác dụng của trọng trường (xem Hình 5.8).



Hình 5.8

(a) Trong gần đúng góc nhỏ hãy tính các mức năng lượng của hệ.

(b) Tìm bổ chính bậc thấp nhất cho năng lượng trạng thái cơ bản gây bởi độ không chính xác của gần đúng góc nhỏ.

(Columbia)

Lời giải:

(a) Lấy vị trí cân bằng của chất điểm làm điểm không của thế năng. Trong gần đúng góc nhỏ, thế năng của hệ là

$$V = mgl(1 - \cos\theta) \approx \frac{1}{2} mgl\theta^2 ,$$

và Hamiltonian là

$$H = \frac{1}{2} ml^2\dot{\theta}^2 + \frac{1}{2} mgl\theta^2 .$$

Bằng cách so sánh nó với dao động tử điều hòa ta thu được các mức năng lượng của hệ là

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega ,$$

trong đó $\omega = \sqrt{g/l}$.

(b) Hamiltonian nhiễu loạn là

$$H' = mgl(1 - \cos\theta) - \frac{1}{2} mgl\theta^2$$
$$\approx -\frac{1}{24} mgl\theta^4 = -\frac{1}{24} \frac{mg}{l^3} x^4 ,$$

với $x = l\theta$. Hàm sóng trạng thái cơ bản của một dao động tử điều hòa là

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$$

với $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$. Bổ chính thấp nhất cho năng lượng trạng thái cơ bản gây bởi độ mất chính xác của gần đúng góc nhỏ là

$$E' = \langle 0|H'|0\rangle = -\frac{1}{24} \frac{mg}{l^3} \langle 0|x^4|0\rangle .$$

Do

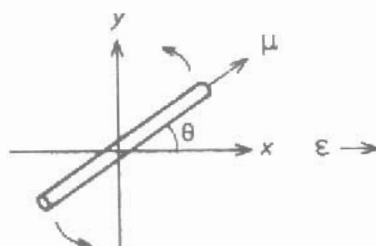
$$\langle 0|x^4|0\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp(-\alpha^2 x^2) dx = \frac{3}{4\alpha^4} ,$$
$$E' = -\frac{\hbar^2}{32ml^2} .$$

5015

Một quay tử (rotor) cứng lượng tử được giới hạn quay trong một mặt phẳng có mômen quán tính I quanh một trục quay và có mômen lưỡng cực điện μ (trong mặt phẳng).

Quay tử này được đặt trong một điện trường đều và yếu ε, nằm trong mặt phẳng quay. Coi điện trường như một nhiễu loạn, hãy tìm các bổ chính khác không cho các mức năng lượng của quay tử.

(*Wlàconsin*)



Hình 5.9

Lời giải:

Chọn mặt phẳng quay của quay tử là mặt xy với trục x song song với ε như chỉ ra trên Hình 5.9. Khi không có tác dụng của điện trường ngoài, Hamiltonian của quay tử là

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2},$$

và phương trình tìm trị riêng

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} = E\psi,$$

có các nghiệm

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\theta}, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \dots,$$

tương ứng với các mức năng lượng

$$E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}.$$

Khi điện trường ngoài tác dụng lên hệ và có thể được coi như là một nhiễu loạn, lúc đó Hamiltonian nhiễu loạn có dạng

$$H' = -\mu\cdot\varepsilon = -\mu\varepsilon\cos\theta.$$

Bổ chính năng lượng bậc nhất là

$$E^{(1)} = \langle m|H'|m\rangle = -\frac{\mu\varepsilon}{2\pi}\int_0^{2\pi}\cos\theta d\theta = 0$$

Bổ chính năng lượng bậc hai là

$$E^{(2)} = \sum_{m' \neq m}{}' \frac{|\langle m'|H'|m\rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_{m'}^{(0)}} .$$

Do

$$\begin{aligned}
\langle m'|H'|m\rangle &= -\frac{\mu\varepsilon}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\theta} \cos\theta \, d\theta \\
&= -\frac{\mu\varepsilon}{4\pi} \int_0^{2\pi} [e^{i(m-m'+1)\theta} + e^{i(m-m'-1)\theta}] \, d\theta \\
&= -\frac{\mu\varepsilon}{2} (\delta_{m',m+1} + \delta_{m',m-1}) ,
\end{aligned}$$

ta có

$$\begin{aligned}
E^{(2)} &= \frac{\mu^2\varepsilon^2}{4} \cdot \frac{2I}{\hbar^2} \left[\frac{1}{m^2 - (m-1)^2} + \frac{1}{m^2 - (m+1)^2}\right] \\
&= \frac{\mu^2\varepsilon^2 I}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{4m^2 - 1} .
\end{aligned}$$

5016

Sự phân cực của một phân tử hai nguyên tử trong điện trường yếu có thể được coi như là một quay tử cứng với mômen quán tính I và mômen lưỡng cực điện **d** trong một điện trường yếu **E**.

(a) Bỏ qua chuyển động khối tâm hãy viết Hamiltonian H cho quay tử cứng dưới dạng $H_0 + H'$.

(b) Giải chính xác bài toán nhiễu loạn. Các mức năng lượng suy biến ra sao?

(c) Hãy tính toán bổ chính bậc thấp nhất cho tất cả các mức năng lượng bằng phương pháp nhiễu loạn không suy biến.

(d) Giải thích tại sao phương pháp nhiễu loạn không suy biến lại có thể áp dụng được trong trường hợp này và các mức sẽ suy biến như thế nào.

Lưu ý hệ thức sau đây:

$$\cos\theta Y_{lm} = \sqrt{\frac{(l+1-m)(l+1+m)}{(2l+1)(2l+1)}}\, Y_{l+1,m} + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}\, Y_{l-1,m}\,.$$

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Chọn trục z theo hướng điện trường. Hamiltonian của quay tử là

$$H = \frac{\mathbf{J}^2}{2I} - \mathbf{d}\cdot\mathbf{E} = \frac{\mathbf{J}^2}{2I} - dE\cos\theta\,.$$

Coi $-dE\cos\theta$ như một nhiễu loạn, ta có

$$H_0 = \frac{\mathbf{J}^2}{2I}\,, \quad H' = -dE\cos\theta\,.$$

(b) Các hàm riêng của hệ không nhiễu loạn là

$$\psi_{jm} = Y_{jm}(\theta,\varphi)\,,$$

trong đó $m = -j, (-j+1), \dots, (j-1), j$, và các trị riêng năng lượng là $E^{(0)}_{jm} = \frac{j(j+1)\hbar^2}{2I}$. Các mức suy biến bậc $(2j+1)$ do $E^{(0)}_{jm}$ hoàn toàn không phụ thuộc vào m.

(c) Bổ chính bậc nhất bằng

$$\begin{aligned}\langle jm| - dE\cos\theta|jm\rangle &= -dE\langle jm|\cos\theta|jm\rangle \\ &= -dE\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\cos\theta\sin\theta d\theta d\varphi = 0\,.\end{aligned}$$

Đối với bổ chính bậc hai ta tính

$$E^{(2)}_n = \sum_i{}' \frac{|\langle n|H'|i\rangle|^2}{E^{(0)}_n - E^{(0)}_i}\,,$$

trong đó n, i kí hiệu cho các cặp j, m và dấu phẩy để chỉ sự loại trừ số hạng $i = n$ trong phép lấy tổng. Do các phần tử ma trận khác không chỉ có

$$\langle j+1, m| - dE\cos\theta|jm\rangle = -dE\sqrt{\frac{(j+1-m)(j+1+m)}{(2j+1)(2j+3)}}\,,$$

$$\langle j-1, m| - dE\cos\theta|jm\rangle = -dE\sqrt{\frac{(j+m)(j-m)}{(2j+1)(2j-1)}}\,.$$

nên bổ chính bậc thấp nhất là

$$
\begin{aligned}
E^{(2)} = & \frac{2Id^2E^2}{\hbar^2} \\
& \times \left\{ \frac{(j+1-m)(j+1+m)}{(2j+1)(2j+3)[j(j+1)-(j+1)(j+2)]} \right. \\
& \left. + \frac{(j+m)(j-m)}{(2j+1)(2j-1)[j(j+1)-j(j-1)]} \right\} \\
= & \frac{Id^2E^2[j(j+1)-3m^2]}{\hbar^2 j(j+1)(2j-1)(2j+3)} .
\end{aligned}
$$

(d) Bởi vì $\langle j'|H'|j\rangle$ trong không gian con j nên lý thuyết nhiễu loạn không suy biến vẫn áp dụng được. Tuy nhiên, thậm chí với nhiễu loạn, sự suy biến không hoàn toàn mất đi. Thực tế các trạng thái có cùng j nhưng có m ngược dấu nhau vẫn bị suy biến.

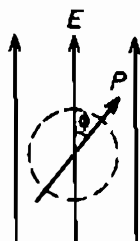
5017

Một quay tử cứng có mômen lưỡng cực điện **P** được giới hạn quay trong một mặt phẳng. Quay tử có mômen quán tính I quanh một trục quay (cố định). Một điện trường yếu và đều **E** nằm trong mặt phẳng quay. Các mức năng lượng của ba trạng thái lượng tử thấp nhất là bao nhiêu tính tới bậc E^2?

(MIT)

Lời giải:

Hamiltonian của quay tử tự do là



Hình 5.10

$$H_0 = \frac{1}{2I} L_\phi^2 = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2}{d\phi^2} .$$

Phương trình Schrödinger này có các trị riêng và các hàm riêng là

$$E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad \psi_m^{(0)}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}.$$

$$(m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

Khi một điện trường đều yếu $\mathbf{E}$ tác dụng vào hệ, Hamiltonian nhiễu loạn có dạng

$$H' = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{P} = \lambda \cos\phi,$$

trong đó $\lambda = -EP$. Các thành phần ma trận của Hamiltonian nhiễu loạn là

$$\langle n|H'|m\rangle = \frac{\lambda}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-n)\phi} \cos\phi \, d\phi = \frac{\lambda}{2} (\delta_{n,m+1} + \delta_{n,m-1}).$$

Định nghĩa $E_m^{(0)}$ và E bởi

$$H_0|m\rangle = E_m^{(0)}|m\rangle, \ (H_0 + H')|\rangle = E|\rangle,$$

và khai triển $|\rangle$ theo các $|m\rangle \equiv \psi_m^{(0)}(\phi)$

$$|\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m|m\rangle.$$

Khi đó

$$(H_0 + H') \sum_m C_m|m\rangle = \sum_m C_m E|m\rangle,$$

hay

$$\sum_m C_m(E - E_m^{(0)})|m\rangle - \sum_m C_m H'|m\rangle = 0.$$

Nhân hai vế với $\langle n|$ đồng thời kể đến tính trực chuẩn của $|m\rangle$ và các tính chất của $\langle n|H'|m\rangle$ đã mô tả ở trên, ta có

$$\sum_m C_m(E - E_m^{(0)})\delta_{mn} - \frac{\lambda}{2} \sum_m C_m(\delta_{m,n-1} + \delta_{m,n+1}) = 0,$$

hay

$$(E - E_n^{(0)})C_n - \frac{\lambda}{2} C_{n-1} - \frac{\lambda}{2} C_{n+1} = 0.$$

Khai triển E và C_n thành chuỗi lũy thừa của λ

$$E = \sum_{\rho=0}^{\infty} E^{(\rho)} \lambda^\rho, \quad C_n = \sum_{\rho=0}^{\infty} C_n^{(\rho)} \lambda^\rho,$$

và thay thế vào phương trình trên ta thu được các phương trình nhiễu loạn cho các bậc khác nhau

$$\lambda^0: \quad (E^{(0)} - E_n^{(0)})\, C_n^{(0)} = 0\,,$$

$$\lambda^1: \quad (E^{(0)} - E_n^{(0)})\, C_n^{(1)} + E^{(1)} C_n^{(0)} - \frac{1}{2}\, C_{n-1}^{(0)} - \frac{1}{2}\, C_{n+1}^{(0)} = 0\,,$$

$$\lambda^2: \quad (E^{(0)} - E_n^{(0)})\, C_n^{(2)} + E^{(1)} C_n^{(1)} + E^{(2)} C_n^{(0)} - \frac{1}{2}\, C_{n-1}^{(1)} - \frac{1}{2}\, C_{n+1}^{(1)} = 0\,,$$

$$\ldots$$

Để tìm được mức năng lượng E_k^0, trước hết ta thấy rằng phương trình bậc không $(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})\, C_n^{(0)} = 0$ đòi hỏi $C_n^{(0)} = 0$ nếu $k \neq n$. Như vậy ta viết

$$C_n^{(0)} = a_k \delta_{n,k} + a_{-k} \delta_{n,-k}\,. \tag{1}$$

Thế vào phương trình bậc nhất dẫn đến

$$(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) C_n^{(1)} + E^{(1)} \left(a_k \delta_{n,k} + a_{-k} \delta_{n,-k}\right) - \frac{1}{2} \left(a_k \delta_{n-1,k} + a_{-k} \delta_{n-1,-k} + a_k \delta_{n+1,k} + a_{-k} \delta_{n+1,-k}\right) = 0\,.$$

Khi $n = \pm k$, ta có

$$E^{(1)} = 0\,.$$

Khi $n \neq \pm k$, ta có

$$C_n^{(1)} = -\frac{1}{2} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \left(a_k \delta_{n-1,k} + a_{-k} \delta_{n-1,-k} + a_k \delta_{n+1,k} + a_{-k} \delta_{n+1,-k}\right)$$
$$= -\frac{1}{2} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \left(C_{n-1}^{(0)} + C_{n+1}^{(0)}\right).$$

Thế $C_n^{(1)}$ vào phương trình bậc hai dẫn đến với $n = k$

$$(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) C_n^{(2)} + E^{(2)} C_n^{(0)} - \frac{1}{2}\, C_{n-1}^{(1)} - \frac{1}{2}\, C_{n+1}^{(1)} = 0\,,$$

tức là,

$$\begin{aligned}
E^{(2)}C_k^{(0)} &= \frac{1}{2}(C_{k-1}^{(1)} + C_{k+1}^{(1)}) \\
&= \frac{1}{2}\left\{ -\frac{1}{2}\frac{1}{E_{k-1}^{(0)} - E_k^{(0)}}(C_{k-2}^{(0)} + C_k^{(0)}) \right. \\
&\quad \left. -\frac{1}{2}\frac{1}{E_{k+1}^{(0)} - E_k^{(0)}}(C_k^{(0)} + C_{k+2}^{(0)}) \right\} \\
&= -\frac{1}{4}\left\{ \frac{1}{E_{k-1}^{(0)} - E_k^{(0)}}(C_{k-2}^{(0)} + C_k^{(0)}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{E_{k+1}^{(0)} - E_k^{(0)}}(C_k^{(0)} + C_{k+2}^{(0)}) \right\}. \qquad (2)
\end{aligned}$$

Đối với trạng thái cơ bản $k = 0$, (1) dẫn đến $C_0^{(0)} \neq 0$, $C_{-2}^{(0)} = C_2^{(0)} = 0$, và như vậy (2) trở thành

$$E^{(2)}C_0^{(0)} = -\frac{1}{4}\left\{ \frac{1}{E_{-1}^{(0)} - E_0^{(0)}} + \frac{1}{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}} \right\} C_0^{(0)} .$$

Do đó

$$E_0^{(2)} = -\frac{1}{2}\frac{1}{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}} = -\frac{I}{\hbar^2} .$$

Đối với trạng thái kích thích đầu tiên $k = \pm 1$, phương trình (1) dẫn đến $C_{\pm 1}^{(0)} \neq 0$, phương trình (2) trở thành

$$\begin{aligned}
E^{(2)}C_1^{(0)} &= -\frac{1}{4}\left\{ \frac{1}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}}(C_{-1}^{(0)} + C_1^{(0)}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}(C_1^{(0)} + C_3^{(0)}) \right\} \\
&= -\frac{1}{4}\left\{ \left(\frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} - \frac{1}{E_1^{(0)}} \right) C_1^{(0)} - \frac{1}{E_1^{(0)}} C_{-1}^{(0)} \right\}
\end{aligned}$$

và

$$E^{(2)}C_{-1}^{(0)} = -\frac{1}{4}\left\{-\frac{1}{E_{-1}^{(0)}}C_1^{(0)} + \left(\frac{1}{E_{-2}^{(0)} - E_{-1}^{(0)}} - \frac{1}{E_{-1}^{(0)}}\right)C_{-1}^{(0)}\right\}$$

$$= -\frac{1}{4}\left\{-\frac{1}{E_1^{(0)}}C_1^{(0)} + \left(\frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} - \frac{1}{E_1^{(0)}}\right)C_{-1}^{(0)}\right\},$$

do $E_0^{(0)} = 0$, $C_{\pm 3}^{(0)} = 0$, hay nói cách khác

$$\left[-\frac{1}{4}\left(\frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} - \frac{1}{E_1^{(0)}}\right) - E^{(2)}\right]C_1^{(0)} + \frac{1}{4}\frac{1}{E_1^{(0)}}C_{-1}^{(0)} = 0.$$

và

$$\frac{1}{4}\frac{1}{E_1^{(0)}}C_1^{(0)} + \left[-\frac{1}{4}\left(\frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} - \frac{1}{E_1^{(0)}}\right) - E^{(2)}\right]C_{-1}^{(0)} = 0$$

Đây là các phương trình thuần nhất theo C_1^0 và C_{-1}^0. Giải phương trình trường kì, ta thu được hai năng lượng cho trạng thái kích thích đầu tiên

$$E_{1+}^{(2)} = \frac{1}{4}\frac{1}{E_1^{(0)}} - \frac{1}{4}\left(\frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} - \frac{1}{E_1^{(0)}}\right) = \frac{5I}{6\hbar^2},$$

$$E_{1-}^{(2)} = -\frac{1}{4}\frac{1}{E_1^{(0)}} - \frac{1}{4}\left(\frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} - \frac{1}{E_1^{(0)}}\right) = -\frac{I}{6\hbar^2}.$$

Đối với trạng thái kích thích thứ hai $k = \pm 2$, phương trình (1) dẫn đến $C_{\pm 2}^{(0)} \neq 0$ và phương trình (2) trở thành

$$E^{(2)}C_{\pm 2}^{(2)} = -\frac{1}{4}\left(\frac{1}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{1}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}}\right)C_{\pm 2}^{(0)}.$$

Suy ra

$$E_2^{(2)} = -\frac{1}{4}\left(\frac{1}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{1}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}}\right) = \frac{I}{15\hbar^2}.$$

Do đó, bổ chính năng lượng tới nhiễu loạn bậc hai cho trạng thái cơ bản là

$$E_0 = \lambda^2 E_0^{(2)} = -\frac{I(Ep)^2}{\hbar^2},$$

đối với trạng thái kích thích thứ nhất là

$$E_{1+} = \frac{\hbar^2}{2I} + \frac{5}{6}\frac{I(Ep)^2}{\hbar^2}, \quad E_{1-} = \frac{\hbar^2}{2I} - \frac{1}{6}\frac{I(Ep)^2}{\hbar^2},$$

và đối với trang thái kích thích thứ hai là

$$E_2 = \frac{2\hbar^2}{I} + \frac{1}{15}\frac{I(Ep)^2}{\hbar^2}.$$

5018

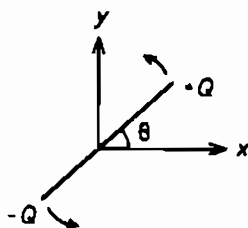
Một thanh có chiều dài d và khối lượng đồng đều được quay quanh tâm và giới hạn trong một mặt phẳng. Thanh có khối lượng M và điện tích $+Q$ và $-Q$ tại hai đầu.

(a) Mô tả hệ này theo quan điểm cơ học lượng tử, tìm Hamiltonian của nó và xác định các hàm riêng và trị riêng tương ứng.

(b) Nếu một điện trường đều yếu **E** nằm trong mặt phẳng quay được tác dụng lên hệ thì các hàm riêng và trị riêng mới tính đến bậc nhất của E là bao nhiêu?

(c) Giả thiết có một điện trường rất mạnh tác dụng, hãy tìm một hàm sóng và năng lượng gần đúng cho trạng thái cơ bản.

(CUS)



Hình 5.11

Lời giải:

(a) Chọn mặt phẳng quay là mặt xy như chỉ ra trên Hình 5.11. Hamiltonian của hệ là

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2},$$

trong đó $I = \frac{1}{12} Md^2$, và phương trình tìm hàm riêng, trị riêng là

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \psi_m(\theta) = E_m \psi_m(\theta) .$$

Các nghiệm của phương trình trên là

$$\psi_m(\theta) = ce^{ik_m \theta} ,$$

trong đó $k_m^2 = \frac{2IE_m}{\hbar^2}$. Để đảm bảo tính đơn trị, tức là $\psi_m(\theta + 2\pi) = \psi_m(\theta)$, ta cần

$$k_m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots .$$

Điều kiện chuẩn hóa các hàm riêng cần có

$$c^2 \cdot 2\pi = 1, \text{ hay } c = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} .$$

Như vậy, các hàm riêng là

$$\psi_m(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_m \theta}, \ k_m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots ,$$

và các trị riêng tương ứng là

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I} k_m^2 = \frac{6\hbar^2}{Md^2} k_m^2 .$$

(b) Chọn hướng của điện trường không đổi $\mathbf{E}$ theo phương x. Như vậy $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_x$, và Hamiltonian của hệ là

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + V(\theta) ,$$

trong đó

$$V(\theta) = -\mathbf{P} \cdot \mathbf{E} = -QdE \cos\theta .$$

Đặt

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} ,$$

coi $V(\theta)$ như là một nhiễu loạn, tức là $\hat{H}' = -QdE \cos\theta$.

Các hàm sóng riêng không nhiễu loạn và các trị riêng đã được đưa ra trong câu (a) và có dạng như sau

$$\psi_m(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta}, \ E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I} = \frac{6\hbar^2 m^2}{Md^2} ,$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots .$$

Do E_m được xác định bởi m^2, nên $\psi_m(\theta)$ và $\psi_{-m}(\theta)$ suy biến. Tuy nhiên do

$$\langle -m|V(\theta)|m\rangle = \int_0^{2\pi} (-QdE)\cos\theta \cdot \frac{1}{2\pi}\, e^{2im\theta} d\theta = 0\,,$$

nên ta vẫn có thể sử dụng các kết quả của lý thuyết nhiễu loạn không suy biến

$$E_m^{(1)} = \langle m|\hat{H}_1|m\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} (-QdE)\cos\theta\, d\theta = 0\,,$$

$$\psi_m^{(1)} = \sum_n{}' \frac{\langle n|\hat{H}_1|m\rangle}{E_m^0 - E_n^0}\,\psi_n^{(0)}\,.$$

Do

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{H}_1|m\rangle &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} (-QdE)\cos\theta \cdot e^{i(m-n)\theta}\, d\theta \\
&= \frac{1}{2\pi}(-QdE)\,\frac{1}{2}\cdot 2\pi(\delta_{m-n+1,0} + \delta_{m-n-1,0}) \\
&= -\frac{1}{2\pi}\, QdE\,(\delta_{m-n+1,0} + \delta_{m-n-1,0})\,, \\
\psi_m^{(1)} &= \frac{Md^3QE}{12\hbar^2}\,\frac{1}{2m+1}\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{i(m+1)\theta} \\
&\quad + \frac{Md^3QE}{12\hbar^2}\cdot\frac{1}{1-2m}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{i(m-1)\theta} \\
&= \frac{Md^3QE}{12\hbar^2\sqrt{2\pi}}\cdot\left[\frac{1}{2m+1}\,e^{i(m+1)\theta} + \frac{1}{1-2m}\,e^{i(m-1)\theta}\right]\,.
\end{aligned}$$

Như vậy, theo nhiễu loạn bậc nhất, các năng lượng và các hàm sóng có dạng như sau

$$E_m = E_m^{(0)} + E_m^{(1)} = \frac{6\hbar^2 m^2}{Md^2}\,,$$

$$\begin{aligned}
\psi_m = \psi_m^{(0)} + \psi_m^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{im\theta} + \frac{Md^3QE}{12\hbar^2\sqrt{2\pi}} \\
&\quad\times\left[\frac{1}{2m+1}\,e^{i(m+1)\theta} + \frac{1}{1-2m}\,e^{i(m-1)\theta}\right]\,.
\end{aligned}$$

(c) Nếu điện trường tác dụng rất mạnh thì xác suất để có θ trong vùng góc nhỏ là rất lớn. Như vậy $\cos\theta \approx 1 - \frac{1}{2}\theta^2$ và Hamiltonian là

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + (-QdE)\left(1 - \frac{1}{2}\theta^2\right)$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{2}QdE\theta^2 - QdE\,.$$

Nó có dạng Hamiltonian của một dao động tử điều hòa (**Bài tập 5008**) với $\omega_0 = \sqrt{\frac{QdE}{I}}$ và một nhiễu loạn $H' = -QdE$. Như vậy, ở trạng thái cơ bản ta có

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + \langle 0|H'|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{QEd}{I}} - QdE = \hbar\sqrt{\frac{3QE}{Md}} - QdE\,,$$
$$\psi_0 = \psi_0^{(0)} + \sum_{n\neq 0}{}' \frac{\langle n|H'|0\rangle}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}}\psi_n^{(0)} = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha\theta^2}\,,$$

trong đó $\alpha = \sqrt{\frac{QEdI}{\hbar^2}}$, do $\langle n|H'|0\rangle = -QdE\langle n|0\rangle = 0$.

5019

(a) Liệt kê tất cả các mức năng lượng của một con quay đối xứng với các mômen quán tính chính $I_1 = I_2 = I \neq I_3$.

(b) Một con quay hơi bị bất đối xứng không có hai mômen I bằng nhau hoàn toàn, nhưng $I_1 - I_2 = \Delta \neq 0$, $I_1 + I_2 = 2I$, $(\Delta/2I) \ll 1$. Tính các năng lượng ứng với $J = 0$ và $J = 1$ tới bậc nhất của (Δ).

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Đặt (x, y, z) là các tọa độ quay cố định trong con quay. Hamiltonian của hệ là

$$H = \frac{1}{2}\left(\frac{J_x^2}{I_1} + \frac{J_y^2}{I_2} + \frac{J_z^2}{I_3}\right)$$
$$= \frac{1}{2I}(J_x^2 + J_y^2) + \frac{1}{2I_3}J_z^2$$
$$= \frac{1}{2I}\mathbf{J}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{I_3} - \frac{1}{I}\right)J_z^2\,.$$

Do đó, một trạng thái với các số lượng tử J, m sẽ có năng lượng

$$E = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) + \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{I_3} - \frac{1}{I}\right) m^2 ,$$

đây cũng chính là các mức năng lượng của con quay đối xứng.

(b) Đối với con quay hơi mất đối xứng, Hamiltonian là

$$H = \frac{1}{2I}\mathbf{J}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{I_3} - \frac{1}{I}\right) J_z^2 + \frac{\Delta}{4I^2}(J_y^2 - J_x^2)$$
$$= H_0 + H' ,$$

trong đó $H' = \frac{\Delta}{4I^2}(J_y^2 - J_x^2)$, được xem như là một nhiễu loạn.

Định nghĩa $J_\pm = J_x \pm iJ_y$ ta có

$$J_x^2 - J_y^2 = \frac{1}{2}(J_+^2 + J_-^2) .$$

Lưu ý rằng

$$J_+|jm\rangle = \sqrt{(j+m+1)(j-m)}|j, m+1\rangle ,$$
$$J_-|jm\rangle = \sqrt{(j-m+1)(j+m)}|j, m-1\rangle ,$$
$$J_\pm^2|jm\rangle = J_\pm(J_\pm|jm\rangle) ,$$

ta có

$$J_+^2|00\rangle = J_-^2|00\rangle = 0 ,$$
$$J_+^2|10\rangle = J_-^2|10\rangle = 0 ,$$
$$J_+^2|1,1\rangle = 0, \quad J_+^2|1,-1\rangle = 2\hbar^2|11\rangle ,$$
$$J_-^2|1,-1\rangle = 0, \quad J_-^2|11\rangle = 2\hbar^2|1,-1\rangle .$$

Như vậy, đối với các trạng thái nhiễu loạn

(i) $J = 0$, $m = 0$, (không suy biến)

$$E_0' = E_0^{(0)} + \langle 00|H'|00\rangle = E_0^{(0)} = 0 .$$

(ii) $J = 1$, $m = 0$, (không suy biến)

$$E_1' = E_1^{(0)} + \langle 10|H'|10\rangle = E_1^{(0)} = \frac{\hbar^2}{I} .$$

(iii) $J = 1$, $m = \pm 1$, (suy biến bậc hai)

Do có suy biến nên trước hết ta tính

$$\langle 1,-1|H'|1,-1\rangle = \langle 1,1|H'|11\rangle = 0\,,$$

$$\langle 1,-1|H'|11\rangle = \langle 11|H|1,-1\rangle = \frac{\Delta\hbar^2}{4I^2}\,.$$

Sau đó ta xây dựng phương trình trường kì

$$\left|\lambda\mathbf{1} - \begin{pmatrix} 0 & \dfrac{\Delta\hbar^2}{4I^2} \\ \dfrac{\Delta\hbar^2}{4I^2} & 0 \end{pmatrix}\right| = 0\,,$$

tức là,

$$\begin{vmatrix} \lambda & -\dfrac{\Delta\hbar^2}{4I^2} \\ -\dfrac{\Delta\hbar^2}{4I^2} & \lambda \end{vmatrix} = 0\,.$$

Phương trình này có hai nghiệm

$$\lambda_\pm = \pm\frac{\Delta\hbar^2}{4I^2}\,,$$

có nghĩa là năng lượng của các trạng thái $J = 1$, $m = \pm 1$, $E_{1,\pm 1}$, tách thành hai mức

$$E_{1,\pm 1} = \frac{\hbar^2}{2I} + \frac{\hbar^2}{2I_3} \pm \frac{\Delta\hbar^2}{4I^2}\,.$$

5020

(a) Sử dụng một hàm sóng hydro đơn giản cho từng electron, hãy dùng lý thuyết nhiễu loạn tính năng lượng ở trạng thái cơ bản của nguyên tử hêli liên quan với tương tác Coulomb electron - electron (bỏ qua các hiệu ứng trao đổi). Sử dụng kết quả này để đánh giá năng lượng ion hóa của hêli.

(b) Hãy tính năng lượng ion hóa bằng cách sử dụng phương pháp biến phân, với điện tích hiệu dụng Z trong hàm sóng hydro là tham biến. So sánh các kết quả trong các câu (a) và (b) với giá trị thực nghiệm của năng lượng ion hóa là $1{,}807E_0$, trong đó $E_0 = \alpha^2 mc^2/2$.

Lưu ý:

$$\psi_{1s}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}\exp(-Zr/a_0), \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2},$$

$$\int\int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 e^{-\alpha(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)}/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = 20\pi^2/\alpha^5 .$$

(Columbia)

Lời giải:

(a) Hamiltonian không nhiễu loạn của hệ là

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_2^1 + \nabla_2^2) - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} .$$

Các hàm sóng có dạng

$$\Phi = \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\,\chi_0(s_{1z}, s_{2z}) .$$

ở trạng thái cơ bản,

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{100}(r_1)\psi_{100}(r_2) ,$$

trong đó

$$\psi_{100}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}\exp\{-Zr/a_0\}$$

với $a_0 = \hbar^2/me^2$. Xét tương tác electron - electron $\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$ như là một nhiễu loạn, bổ chính năng lượng bậc nhất trong lý thuyết nhiễu loạn sẽ bằng

$$\begin{aligned}
\Delta E = \langle H' \rangle &= e^2 \int\int \frac{d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}|\psi_{100}(r_1)|^2|\psi_{100}(r_2)|^2 \\
&= e^2\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^2 \int\int \frac{d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\exp\left[-\frac{2Z}{a_0}(r_1 + r_2)\right] \\
&= e^2\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^2 \cdot \frac{20\pi^2}{\left(\frac{2Z}{a_0}\right)^5} = \frac{5Ze^2}{8a_0} .
\end{aligned}$$

Các mức năng lượng của một nguyên tử dạng hydro được tính bởi

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0}\frac{Z^2}{n^2} .$$

và như vậy năng lượng ở trạng thái cơ bản của hệ (khi chưa tính đến tương tác Coulomb electron - electron) là

$$E_0 = -2\,\frac{e^2 Z^2}{2a_0} = -\frac{e^2 Z^2}{a_0}\,.$$

Do vậy, năng lượng đã được bổ chính của trạng thái cơ bản của hêli là

$$E = -\frac{e^2 Z^2}{a_0} + \frac{5Ze^2}{8a_0} = -\frac{11e^2}{4a_0}\,,$$

với $Z = 2$ đối với các hạt nhân hêli.

Năng lượng ion hóa là năng lượng cần thiết để đưa hai electron của nguyên tử hêli ra xa vô hạn. Như vậy, ở trạng thái cơ bản

$$I = -\frac{e^2 Z^2}{2a_0} - \left(-\frac{e^2 Z^2}{a_0} + \frac{5Ze^2}{8a_0}\right) = \frac{3e^2}{4a_0}$$

với $Z = 2$ đối với các hạt nhân hêli, tức là

$$I = 1,5E_0\,,$$

với

$$E_0 = \frac{e^2}{2a_0} = \frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 mc^2 = \frac{1}{2}\,\alpha^2 mc^2\,,$$

trong đó α là hằng số cấu trúc tinh tế.

(b) Hamiltonian của He có tính đến tương tác electron - electron là

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_1^2 + \nabla_2^2\right) - Ze^2/r_1 - Ze^2/r_2 + e^2/r_{12}$$

với $Z = 2$, $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Đối với trạng thái cơ bản ta sử dụng hàm sóng thử

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \lambda) = \frac{\lambda^3}{\pi}\, e^{-\lambda(r_1+r_2)}\,.$$

Đặt $u(r) = e^{-\lambda r}$. Khi đó

$$\left(-\frac{1}{2}\,\nabla^2 - \frac{\lambda}{r}\right) u(r) = -\frac{\lambda^2}{2}\, u(r)\,,$$

tức là,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 - \frac{\lambda\hbar^2}{mr}\right) u(r) = -\frac{\lambda^2\hbar^2}{2m}\, u(r)\,.$$

Đặt

$$Ze^2 - \frac{\lambda\hbar^2}{m} = \sigma \,,$$

Sử dụng các kết quả trên, ta có

$$\begin{aligned}\bar{H} &= \int\int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \Phi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}\right)\Phi \\ &= \int\int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \Phi^* \left(-\frac{\lambda^2\hbar^2}{m} - \frac{\sigma}{r_1} - \frac{\sigma}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}\right)\Phi \\ &= -\frac{\lambda^2\hbar^2}{m} - \frac{2\sigma\lambda^3}{\pi}\int \frac{e^{-2\lambda r_1}}{r_1} d^3\mathbf{r}_1 + \frac{e^2\lambda^6}{\pi^2}\int\int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \frac{e^{-2\lambda(r_1+r_2)}}{r_{12}} \,.\end{aligned}$$

Do

$$\int \frac{e^{-2\lambda r_1}}{r_1} d^3\mathbf{r}_1 = \int_0^\infty \frac{e^{-2\lambda r_1}}{r_1} 4\pi r_1^2 dr_1 = \pi/\lambda^2 \,,$$

$$\begin{aligned}\bar{H} &= -\frac{\lambda^2\hbar^2}{m} - 2\sigma\lambda + \frac{\lambda^6}{\pi^2}\frac{20\pi^2}{(2\lambda)^5} \\ &= \frac{\lambda^2\hbar^2}{m} - \left(2Z - \frac{5}{8}\right) e^2\lambda \,.\end{aligned}$$

Đặt $\frac{\partial \bar{H}}{\partial \lambda} = 0$, ta thu được

$$\lambda = \frac{me^2}{2\hbar^2}\left(2Z - \frac{5}{8}\right) \,.$$

Bởi vậy, năng lượng ở trạng thái cơ bản là

$$E = -\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2 \frac{me^4}{\hbar^2} = -\left(\frac{27}{16}\right)^2 \frac{e^2}{a_0} \,,$$

do $Z = 2$, $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$, và năng lượng ion hóa ở trạng thái cơ bản là

$$I = -\frac{Z^2e^2}{2a_0} + \left(Z - \frac{5}{16}\right)^2 \frac{e^2}{a_0} = \left[\left(\frac{27}{16}\right)^2 - 2\right]\frac{e^2}{a_0} = 1,695E_0$$

Như vậy, kết quả tính từ phương pháp biến phân phù hợp tốt hơn với thực nghiệm.

5021

Một hạt có khối lượng m chuyển động một chiều trong thế tuần hoàn

$$V(x) = V_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right).$$

Ta biết rằng các trạng thái năng lượng riêng có thể phân thành các loại được đặc trưng bởi góc θ với các hàm sóng $\phi(x)$ tuân theo điều kiện $\phi(x+a) = e^{i\theta}\phi(x)$ với tất cả các giá trị của x. Đối với loại $\theta = \pi$, điều kiện này trở thành $\phi(x+a) = -\phi(x)$ (phản tuần hoàn trên khoảng cách a).

(a) Thậm chí khi $V_0 = 0$, ta vẫn có thể phân loại các trạng thái riêng thông qua θ. Với những giá trị nào của k thì sóng phẳng $\phi(x) = e^{ikx}$ thỏa mãn điều kiện phản tuần hoàn trên khoảng cách a? Phổ năng lượng của loại $\theta = \pi$ với $V_0 = 0$ là như thế nào?

(b) Khi V_0 nhỏ (tức là $V_0 \ll \hbar^2/ma^2$), hãy tính hai trị riêng năng lượng thấp nhất bằng cách sử dụng lý thuyết nhiễu loạn bậc nhất.

(MIT)

Lời giải:

(a) Đối với sóng phẳng $\psi(x) = e^{ikx}$, ta có

$$\psi(x+a) = e^{ik(x+a)} = e^{ika}\psi(x).$$

Nếu k thỏa mãn điều kiện

$$ka = (2n+1)\pi, \ (n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$$

thì sóng phẳng này thỏa mãn điều kiện phản tuần hoàn

$$\psi(x+a) = -\psi(x).$$

Phổ năng lượng tương ứng là

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(2n+1)^2. \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$$

(b) Nếu $V_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}$, ta có thể coi

$$H' = V_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

như là một nhiễu loạn tác động lên chuyển động tự do của một hạt. Đối với trạng thái cơ bản, trị riêng và hàm riêng của hạt tự do tương ứng là ($n = 0, -1$; tức là, $ka = \pi, -\pi$)

$$E^{(0)}_{\left(\begin{smallmatrix}0\\-1\end{smallmatrix}\right)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2},$$

$$\psi^{(0)}_0(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\, e^{i\pi x/a},$$

$$\psi^{(0)}_{-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\, e^{-i\pi x/a}.$$

Đặt $\frac{2\pi}{a} = \beta$ và xét $\langle m|H'|n\rangle$. Ta có

$$\langle -1|H'|-1\rangle = \langle 0|H'|0\rangle = \frac{V_0}{a}\int_0^a \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = 0,$$

$$\langle -1|H'|0\rangle = \langle 0|H'|-1\rangle = \frac{V_0}{2a}\int_0^a e^{\pm i\beta x}(e^{i\beta x} + e^{-i\beta x})\, dx$$

$$= \frac{V_0}{2}.$$

Như vậy, đối với trạng thái cơ bản,

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & \frac{V_0}{2} \\ \frac{V_0}{2} & 0 \end{pmatrix},$$

và phương trình thế kỉ cho nhiễu loạn bậc nhất là

$$\begin{vmatrix} E^{(1)} & \frac{V_0}{2} \\ \frac{V_0}{2} & E^{(1)} \end{vmatrix} = 0,$$

dẫn đến

$$E^{(1)} = \pm\frac{V_0}{2}.$$

Như vậy, mức năng lượng cơ bản tách thành thành hai mức

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} - \frac{V_0}{2}, \quad E_2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} + \frac{V_0}{2}.$$

Đây là hai trị riêng năng lượng thấp nhất của hệ.

5022

Một electron chuyển động một chiều (x) dưới điều kiện biên tuần hoàn, tức là hàm sóng sẽ trở thành chính nó khi khoảng cách biến đổi một đoạn L (L lớn).

(a) Viết dạng Hamiltonian cho hạt tự do, và các trạng thái dừng của hệ. Bậc suy biến của các trạng thái này là bao nhiêu?

(b) Bây giờ, cộng thêm số hạng nhiễu loạn

$$V(x) = \varepsilon \cos qx ,$$

trong đó $qL = 2\pi N$ (N là một số nguyên lớn), hãy tính lại các mức năng lượng và các trạng thái dừng tới bậc nhất của ε đối với xung lượng electron bằng $q/2$.

(c) Tính bổ chính năng lượng tới bậc ε^2 cho đáp số của bạn trong phần (b).

(d) Tính lại câu (b) đối với xung lượng electron gần nhưng không bằng $q/2$. (Không tính toán cho các trạng thái dừng.)

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Hamiltonian của một hạt tự do khối lượng m là

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}.$$

Hàm sóng của các trạng thái dừng của nó là

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\, e^{ikx} ,$$

trong đó

$$k = \frac{2\pi}{L} n. \quad (n = \pm 1, \pm 2, \ldots)$$

Tất cả các trạng thái năng lượng có $E = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}n^2$ và có bậc suy biến bằng 2.

(b) Do N là số nguyên lớn nên ta có thể coi $\frac{q}{2} = \frac{\pi N}{L}$ là trung điểm của vùng Brillouin và coi

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{qx}{2}, \quad \psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{qx}{2}$$

là các vectơ trạng thái. Với nhiễu loạn $H' = E\cos qx$, trong đó $q = \frac{2\pi N}{L}$, trước hết ta tính toán $\langle m|H'|n\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle 1|H'|2\rangle &= \langle 2|H'|1\rangle \\
&= \frac{2\varepsilon}{L}\int_0^L \sin\frac{qx}{2}\cos\frac{qx}{2}\cos qx dx = 0, \\
\langle 1|H'|1\rangle &= -\langle 2|H'|2\rangle \\
&= \frac{2\varepsilon}{L}\int_0^L \cos^2\left(\frac{qx}{2}\right)\cos qx dx = \frac{\varepsilon}{2}.
\end{aligned}$$

Như vậy, ma trận nhiễu loạn là

$$\begin{pmatrix} \frac{\varepsilon}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\varepsilon}{2} \end{pmatrix}.$$

Do ma trận này đã được chéo hóa nên các bổ chính năng lượng tới gần đúng bậc nhất là $\pm\frac{\varepsilon}{2}$. Như vậy, các mức năng lượng và các hàm sóng của hệ tương ứng là

$$\begin{aligned}
E_1' &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \frac{\varepsilon}{2}, \quad \psi_1'(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{qx}{2}; \\
E_2' &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{q}{2}\right)^2 - \frac{\varepsilon}{2}, \quad \psi_2'(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{qx}{2}.
\end{aligned}$$

(c) Các bổ chính năng lượng chính xác đến bậc ε^2 được tính bởi lý thuyết

(d) Đặt xung lượng là $\frac{q}{2}+\Delta$, trong đó Δ là số âm hoặc dương nhỏ, và lấy hàm sóng có dạng

$$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{q}{2}+\Delta\right)x\approx\sqrt{\frac{2}{L}}\left(\cos\frac{qx}{2}-\Delta x\sin\frac{qx}{2}\right),$$

$$\psi_2(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{q}{2}+\Delta\right)x\approx\sqrt{\frac{2}{L}}\left(\sin\frac{qx}{2}+\Delta x\cos\frac{qx}{2}\right).$$

Theo quy trình tính trong câu (b) ta tìm được các phần tử của ma trận nhiễu loạn bậc nhất cũng giống như trong câu (b) nếu các đại lượng có bậc như bậc $\varepsilon\Delta$ nhỏ có thể bỏ qua. Như vậy, các bổ chính năng lượng bậc nhất cũng bằng các giá trị bổ chính tìm được ở câu (b).

5023

Xét chuyển động một chiều của một electron bị giam trong giếng thế $V(x)=\frac{1}{2}kx^2$ và chịu một điện trường nhiễu loạn $\mathbf{F}=F\hat{\mathbf{x}}$.

(a) Xác định độ dịch các mức năng lượng của hệ gây bởi điện trường đó.

(b) Mômen lưỡng cực của hệ ở trạng thái n được định nghĩa là $P_n=-e\langle x\rangle_n$, trong đó $\langle x\rangle_n$ giá trị kì vọng của x ở trạng thái n. Hãy tìm mômen lưỡng cực của hệ khi có mặt điện trường.

(*Wlàconsin*)

Lời giải:

(a) Hamiltonian của hệ là

$$\begin{aligned}H&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}kx^2-qFx\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}k\left(x-\frac{qF}{k}\right)^2-\frac{q^2F^2}{2k}\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2+\frac{1}{2}kx'^2-\frac{q^2F^2}{2k},\end{aligned}$$

trong đó $x'=x-\frac{qF}{k}$.

Như vậy, độ dịch năng lượng gây bởi điện trường nhiễu loạn $F\hat{\mathbf{x}}$ là

$$E'=\frac{q^2F^2}{2k}=\frac{e^2F^2}{2k}.$$

(b) Giá trị kì vọng của x ở trạng thái n là

$$\langle x\rangle_n = \left\langle x' + \frac{qF}{k}\right\rangle = \langle x'\rangle + \left\langle \frac{qF}{k}\right\rangle = \frac{qF}{k}\,.$$

Do đó, mômen lưỡng cực của hệ là

$$P_n = -e\,\frac{qF}{k} = e^2\,\frac{F}{k}\,,(q=-e)\,.$$

5024

Nếu một quả cầu rất nhỏ có mật độ đồng nhất và tích điện ở trong thế tĩnh điện $V(r)$ thì có thế năng là $U(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + \frac{1}{6}r_0^2\nabla^2V(\mathbf{r}) + \cdots$, trong đó **r** là vị trí tâm của điện tích và r_0 là bán kính rất nhỏ của quả cầu. Độ dịch Lamb có thể được hiểu như là một bổ chính nhỏ cho các mức năng lượng của nguyên tử hydro bởi vì electron của nó có tính chất này. Nếu số hạng r_0^2 trong U được xem như là một nhiễu loạn rất nhỏ so với tương tác Coulomb $V(\mathbf{r}) = -e^2/r$, thì độ dịch Lamb của các mức $1s$ và $2p$ của nguyên tử hydro là bao nhiêu? Biểu diễn kết quả của bạn qua r_0 và các hằng số cơ bản.

Các hàm sóng không nhiễu loạn là

$$\psi_{1s}(\mathbf{r}) = 2a_B^{-3/2}\cdot e^{-r/a_B}Y_0^0\,;\;\psi_{2pm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{24}}\,a_B^{-5/2}re^{-r/2a_B}Y_1^m\,,$$

trong đó $a_B = \hbar^2/m_e e^2$.

(*CUS*)

Lời giải:

Trạng thái $1s$ là không suy biến, do đó bổ chính năng lượng là

$$\Delta E = \langle 1s|H'|1s\rangle\,.$$

Do

$$H' = \frac{r_0^2}{6}\nabla^2V(\mathbf{r}) = \frac{r_0^2}{6}(-e^2)\nabla^2\frac{1}{r}$$
$$= \frac{r_0^2}{6}(-e^2)(-4\pi)\delta(\mathbf{r}) = \frac{2\pi}{3}r_0^2e^2\delta(\mathbf{r})\,,$$

$$Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\,,$$

ta có

$$\Delta E = \int \frac{2\pi}{3} r_0^2 e^2 \delta(\mathbf{r}) |\psi_{1s}(\mathbf{x})|^2 \, d\mathbf{x}$$
$$= \frac{2\pi}{3} r_0^2 e^2 |\psi_{1s}(0)|^2 = \frac{2}{3} \frac{r_0^2 e^2}{a_B^3} .$$

Nhiễu loạn H' là một hàm delta δ, chỉ có tác dụng khi $\psi(0) \neq 0$. Vì $\psi_{2pm}(0) = 0$, H' không gây ảnh hưởng gì đến năng lượng, tức là $\Delta E_{2pm} = 0$.

5025

Positroni là một nguyên tử tựa hydro nhưng với hạt nhân là positron thay vì proton. Trong giới hạn phi tương đối tính, các mức năng lượng và các hàm sóng của nguyên tử này cũng giống như của nguyên tử hydro chỉ khác nhau bởi các hệ số.

(a) Từ hiểu biết của mình về nguyên tử hydro, hãy viết hàm sóng chuẩn hóa cho trạng thái cơ bản $1s$ của positroni. Sử dụng các tọa độ cầu và bán kính Bohr a_0 của hydro làm các tham số về thang.

(b) Đánh giá bán kính căn quân phương của trạng thái $1s$ theo đơn vị a_0. Đây là đánh giá cho đường kính hay bán kính của positroni?

(c) Ở các trạng thái s của positroni có một tương tác tiếp xúc siêu tinh tế

$$H_{\text{int}} = -\frac{8\pi}{3} \mu_e \cdot \mu_p \, \delta(\mathbf{r}) ,$$

trong đó μ_e và μ_p là các mômen từ của electron và positron

$$\left(\mu = g \frac{e}{2mc} \mathbf{s} \right) .$$

Đối với các electron và positron, $|g| = 2$. Sử dụng lý thuyết nhiễu loạn bậc nhất hãy tính hiệu năng lượng giữa các trạng thái cơ bản bội ba và mức đơn. Xác định xem mức nào là mức thấp nhất. Biểu diễn sự tách mức năng lượng theo đơn vị GHz (tức là năng lượng chia cho hằng số Planck). Đưa ra một con số!

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Tương tự như nguyên tử hydro hàm sóng chuẩn hóa cho trạng thái cơ

bản $1s$ của positroni là

$$\psi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} e^{-r/2a_0}$$

với $a_0 = \frac{\hbar}{me^2}$, m là khối lượng nghỉ của electron. Chú ý rằng thừa số 2 ở trước a_0 là do khối lượng rút gọn $\mu = \frac{1}{2}m$.

(b) Bán kính bình phương trung bình của trạng thái $1s$ là

$$\langle r^2\rangle = \frac{1}{8\pi a_0^3}\int_0^\infty e^{-r/a_0}\, r^2 \cdot r^2 dr = \frac{a_0^2}{8\pi}\int_0^\infty e^{-x}\, x^4 dx = \frac{3a_0^2}{\pi},$$

và bán kính căn quân phương trung bình là

$$\sqrt{\langle r^2\rangle} = \sqrt{\frac{3}{\pi}}\, a_0 .$$

Giá trị này có thể được xem như là bán kính thực tế của positroni.

(c) Kể đến cả spin thì ta phải mô tả một trạng thái của hệ qua $|n, l, m, S, S_z\rangle$, trong đó S và S_z lần lượt là số spin toàn phần và hình chiếu của nó lên phương z. Như vậy

$$\begin{aligned}
&\langle 100S'S'_z|H_{\text{int}}|100SS_z\rangle \\
&= \int d^3\mathbf{r}\psi^*_{100}(\mathbf{r})\left(-\frac{8\pi}{3}\right)\delta(\mathbf{r})\psi_{100}(\mathbf{r})\,\chi^+_{s'}(S'_z)\mu_e\cdot\mu_p\chi_s(S_z) \\
&= \frac{8\pi}{3}\left(\frac{e}{mc}\right)^2|\psi_{100}(0)|^2\chi^+_{s'}(S'_z)\,\mathbf{s}_e\cdot\mathbf{s}_p\chi_s(S_z) \\
&= \frac{1}{3}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\cdot\frac{e^2}{a_0}\cdot\left[\frac{1}{2}S(S+1) - \frac{3}{4}\right]\delta_{SS'}\delta_{S_zS'_z},
\end{aligned}$$

trong đó, ta đã sử dụng

$$\mathbf{S} = \mathbf{s}_e + \mathbf{s}_p$$

và do

$$\begin{aligned}
\mathbf{s}_e\cdot\mathbf{s}_p &= \frac{1}{2}[\mathbf{S}^2 - (\mathbf{s}_e^2 + \mathbf{s}_p^2)] \\
&= \frac{1}{2}\left[S(S+1) - 2\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}+1\right)\right].
\end{aligned}$$

Đối với trạng thái đơn, $S = 0$, $S_z = 0$,

$$\Delta E_0 = -\frac{1}{4}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{e^2}{a_0} < 0\,.$$

Đối với trạng thái bội ba, $S = 1$, $S_z = 0, \pm 1$,

$$\Delta E_1 = \frac{1}{12}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{e^2}{a_0} > 0\,.$$

Như vậy, trạng thái cơ bản đơn tuyến có năng lượng thấp nhất và sự tách mức năng lượng của trạng thái cơ bản là

$$\begin{aligned}\Delta E_1 - \Delta E_0 &= \left(\frac{1}{12}+\frac{1}{4}\right)\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{e^2}{a_0} = \frac{1}{3}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 mc^2 \\ &= \frac{1}{3}\left(\frac{1}{137}\right)^4 \cdot 0,51\times 10^6 = 4,83\times 10^{-4}\,\text{eV}\,,\end{aligned}$$

tương ứng với

$$\nu = \Delta E/h = 1,17\times 10^{11}\text{Hz} = 117\ \text{GHz}\,.$$

5026

Coi proton như là một quả cầu tích điện bán kính R. Sử dụng lý thuyết nhiễu loạn bậc nhất hãy tính sự thay đổi năng lượng liên kết của hydro gây bởi bản chất không phải là điện tích điểm của proton. Dấu trong kết quả của bạn có mang ý nghĩa vật lý gì không? Giải thích.

Lưu ý: Bạn có thể sử dụng phép gần đúng $R \ll a_0$ trong suốt bài toán này, trong đó a_0 là bán kính Bohr.

(MIT)

Lời giải:

Nếu ta coi proton là một quả cầu bán kính R và điện tích e thì thế năng của electron có điện tích $-e$ là

$$V(r) = \begin{cases} -\dfrac{e^2}{R}, & 0 \le r \le R, \\ -\dfrac{e^2}{r}, & R \le r \le \infty\,. \end{cases}$$

Lấy hiệu giữa $V(r)$ ở trên và thế năng $-\frac{e^2}{r}$ và coi nó như là một nhiễu loạn cho bài toán proton điện tích điểm

$$H' = \begin{cases} \dfrac{e^2}{r} - \dfrac{e^2}{R}, & 0 \le r \le R, \\ 0 & R \le r \le \infty . \end{cases}$$

Bổ chính năng lượng theo nhiễu loạn bậc nhất là

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int_0^R \left(\frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{R}\right) r^2 R_{10}^2 \, dr \\ &= \frac{4}{a_0^3} \int_0^R \left(\frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{R}\right) r^2 e^{-2r/a_0} \, dr \\ &\approx \frac{4}{a_0^3} \int_0^R \left(\frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{R}\right) r^2 dr = \frac{2e^2 R^2}{3a_0^3} . \quad (R \ll a_0) \end{aligned}$$

Do $\Delta E > 0$, nên mức năng lượng trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro sẽ phải tăng lên vì bản chất của proton không phải là điện tích điểm, tức là năng lượng liên kết của hydro phải giảm đi. Về mặt vật lý, so sánh giữa hai mô hình điện tích điểm và cấu trúc vỏ ta thấy trong mô hình cấu trúc vỏ có tồn tại thêm cả lực đẩy. Nguyên tử hydro bền vững được là do lực hút nên bản chất khác điện tích điểm của proton thì sẽ làm yếu tương tác hút của hệ và do đó làm giảm năng lượng liên kết.

5027

Giả thiết rằng proton có bán kính $r_p \approx 10^{-13}$ cm và điện tích của nó được phân bố đều trong thể tích. Tìm độ dịch năng lượng của các trạng thái $1s$ và $2p$ của hydro gây bởi sự khác nhau giữa phân bố điện tích điểm và phân bố điện tích có kích thước.

(*Columbia*)

Lời giải:

Lực Coulomb mà một electron ở bên trong quả cầu proton phải chịu là

$$F = -e^2 \left(\frac{r}{r_p}\right)^3 \frac{1}{r^2} \mathbf{e}_r = -\frac{e^2}{r_p^3} r \mathbf{e}_r .$$

Thế năng điện của electron là

$$V_1 = \frac{e^2}{2r_p^3} r^2 + C \quad \text{với} \quad r \le r_p ,$$

$$V_2 = -\frac{e^2}{r} \quad \text{với} \quad r \ge r_p ,$$

Tính liên tục của r_p đòi hỏi $V_1(r_p) = V_2(r_p)$, dẫn đến $C = -\frac{3}{2}\frac{e^2}{r_p}$. Như vậy

$$V(r) = \begin{cases} -\dfrac{e^2}{r}, & r > r_p, \\ \dfrac{e^2}{2r_p}\left[\left(\dfrac{r}{r_p}\right)^2 - 3\right], & r \le r_p . \end{cases}$$

Hamiltonian của hệ bằng

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' ,$$

trong đó

$$\hat{H}' = \begin{cases} 0, & r > r_p , \\ \dfrac{e^2}{2r_p}\left[\left(\dfrac{r}{r_p}\right)^2 + \dfrac{2r_p}{r} - 3\right], & r \le r_p \end{cases}$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} .$$

Như vậy

$$\begin{aligned} E'_{nl} = \langle nlm|H'|nlm\rangle = \langle nl|H'|nl\rangle &= \int_0^\infty R^*_{nl} R_{nl} H'(r) r^2 dr \\ &= \int_0^{r_p} R^*_{nl}(r) R_{nl}(r) \\ &\quad \times \frac{e^2}{2r_p}\left[\left(\frac{r}{r_p}\right)^2 + \frac{2r_p}{r} - 3\right] r^2 dr , \end{aligned}$$

trong đó

$$R_{10} = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a}, \quad R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}a^{3/2}} \times \frac{r}{a} e^{-r/2a}$$

với $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$.

Do $r_p \ll a$ nên ta có thể lấy $e^{-r/a} \approx 1$. Lấy tích phân của biểu thức dịch mức năng lượng ta thu được các độ dịch năng lượng của các trạng thái $1s$ và $2p$ là

$$E'_{10} = \langle 10|H'|10\rangle \approx \frac{2e^2 r_p^2}{5a^3},$$

$$E'_{21} = \langle 21|H'|21\rangle \approx \frac{e^2 r_p^4}{1120a^5}.$$

5028

Một nguyên tử có một hạt nhân điện tích Z và một electron. Hạt nhân có bán kính R, trong đó điện tích hay nói cách khác các proton được phân bố đều. Ta muốn nghiên cứu hiệu ứng của kích thước hữu hạn của hạt nhân lên các mức năng lượng của electron

(a) Hãy tính thế năng có tính đến kích thước hữu hạn của hạt nhân.

(b) Hãy sử dụng lý thuyết nhiễu loạn tính độ dịch mức do kích thước của hạt nhân đối với trạng thái $1s$ của Pb^{208} s.

(Giả thiết rằng R nhỏ hơn nhiều bán kính Bohr và sử dụng dạng hàm sóng gần đúng)

(c) Cho đáp số câu (b) theo cm^{-1} giả thiết $R = r_0 A^{1/3}$, trong đó $r_0 = 1,2$ fermi.

(Columbia)

Lời giải:

(a) Điện trường E của một quả cầu đồng nhất bán kính R và điện tích Q được tính bởi định lý Gauss

$$4\pi r^2 E = \begin{cases} 4\pi Q, & r \geq R, \\ 4\pi \left(\frac{4\pi}{3} r^3 \rho\right) = 4\pi \cdot \left(\frac{r}{R}\right)^3 Q, & r < R. \end{cases}$$

tức là

$$E = \begin{cases} \frac{Q}{r^2}, & r \geq R, \\ \frac{r}{R^3} Q, & r < R. \end{cases}$$

Như vậy, thế năng điện của một electron trong trường Coulomb của hạt nhân có kích thước hữu hạn điện tích Ze là

$$V = -\int_r^\infty eEdr$$
$$= \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{r}, & r \geq R, \\ -\dfrac{Ze^2}{2R}\left[1-\left(\dfrac{r}{R}\right)^2\right] - \dfrac{Ze^2}{R} = \dfrac{-Ze^2}{2R}\left[3-\left(\dfrac{r}{R}\right)^2\right], & r < R. \end{cases}$$

(b) Viết lại thế năng dưới dạng

$$V = V_0 + V',$$

trong đó

$$V' = \begin{cases} 0, & r \geq R, \\ \dfrac{Ze^2}{r} - \dfrac{Ze^2}{2R}\left[3-\left(\dfrac{r}{R}\right)^2\right], & r < R, \end{cases}$$

và coi V' như một nhiễu loạn. Bổ chính năng lượng cho trạng thái $1s$ tới bậc nhất là

$$\Delta E_{1s} = \langle 1s|V'|1s\rangle = \int_0^\infty |\psi_{1s}|^2 V' 4\pi r^2 dr$$
$$\approx 4\pi\frac{Z^3}{\pi a^3}\int_0^R V' r^2 dr \approx \frac{2}{5}\frac{Ze^2}{a}\left(\frac{R}{a}\right)^2,$$

trong đó $a = \frac{\hbar^2}{m_e Ze^2}$, do

$$\psi_{1s} = R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\varphi) = 2\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-Zr}{a}} \cdot \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \approx \left(\frac{Z^3}{\pi a^3}\right)^{\frac{1}{2}}$$

với $r \leq R \ll a$.

(c) Pb^{208} có $Z = 82$, $A = 208$, như vậy

$$\Delta E_{1s} = \frac{2}{5}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 (mc^2)^3 \left(\frac{R}{\hbar c}\right)^2 Z^4$$
$$= \frac{2}{5}\left(\frac{1}{137}\right)^4 \times (0,51\times 10^6)^3 \times \left(\frac{1,2\times 10^{-13}\times 208^{\frac{1}{3}}}{6,58\times 10^{-16}\times 3\times 10^{10}}\right)^2 \times 82^4$$
$$= 8,83\ \text{eV}.$$

Số sóng tương ứng là

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{\Delta E}{hc} = \frac{8,83}{4,135 \times 10^{-15} \times 3 \times 10^{10}}$$
$$= 7,12 \times 10^4 \text{ cm}^{-1} .$$

5029

Xét một nguyên tử tựa hydro hình thành khi một nguyên tử nhôm ($Z = 13$, $A = 27$) bị bóc hết các electron và chỉ còn lại một. Hãy tính hiệu ứng của kích thước hữu hạn của hạt nhân (giả thiết là có phân bố điện tích đều) lên trạng thái cơ bản, tức là tính sự chênh lệch giữa mức năng lượng cơ bản khi hạt nhân có kích thước thực tế và mức năng lượng cơ bản của hạt nhân điện tích điểm. Biểu diễn kết quả: (a) bằng đơn vị electron vôn, (b) theo tỉ phần năng lượng ion hóa của nguyên tử đó.

(*Berkeley*)

Lời giải:

Nếu ta coi hạt nhân là một quả cầu tích điện đồng nhất thì thế năng điện của electron là

$$V_1 = -Ze^2/r \quad \text{với} \quad r > \rho ,$$

ρ là bán kính hạt nhân. Bên trong hạt nhân electron chịu tác dụng một lực Coulomb $F = -Ze^2 \left(\frac{r}{\rho}\right)^3 \frac{1}{r^2} = -Ze^2 r/\rho^3$, thế năng tương ứng là $V = \frac{Ze^2}{2\rho^3} r^2 + C$, trong đó C là một hằng số. Tính liên tục tại bề mặt hạt nhân, $V_1(\rho) = V_2(\rho)$, đòi hỏi $C = -\frac{3}{2} \frac{Ze^2}{\rho}$. Như vậy

$$V(r) = \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{r}, & r \geq \rho , \\ \dfrac{Ze^2}{2\rho} \left[\left(\dfrac{r}{\rho}\right)^2 - 3 \right], & r \leq \rho . \end{cases}$$

Hamiltonian của electron có thể được viết thành

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0(r) + H' ,$$

trong đó

$$V_0(r) = -\frac{Ze^2}{r} , \quad (\infty > r > 0) ,$$

và

$$H' = \begin{cases} 0, & r \geq \rho, \\ \dfrac{Ze^2}{2\rho}\left[\left(\dfrac{r}{\rho}\right)^2 + \dfrac{2\rho}{r} - 3\right], & r \leq \rho \end{cases}$$

được xét như là một nhiễu loạn.

Bổ chính năng lượng bậc nhất khi đó sẽ là

$$\begin{aligned}\langle 100|H'|100\rangle &= \int_0^\infty R_{10}^*(r)R_{10}(r)H'(r)r^2dr \\ &= \int_0^\rho R_{10}^2(r)\frac{Ze^2}{2\rho}\left[\left(\frac{r}{\rho}\right)^2 + \frac{2\rho}{r} - 3\right] r^2dr \\ &= \int_0^\rho \frac{Z^4e^2}{a^3}e^{-2Zr/a}\left(\frac{1}{r} - \frac{3}{2\rho} + \frac{r^2}{2\rho^3}\right)4r^2dr,\end{aligned}$$

trong đó $a = \hbar^2/m_e e^2 = 5,3 \times 10^{-9}$ cm (bán kính Bohr).

Do

$$\rho = r_0A^{1/3},\ r_0 = 1,2 \times 10^{-13}\,\text{cm},\ \frac{Z\rho}{a} = \frac{r_0A^{1/3}Z}{a} = 0,88 \times 10^{-3} \ll 1,$$

nên ta có thể coi $e^{-2Zr/a} \approx 1$ và

$$\begin{aligned}\Delta E &= \langle 100|H'|100\rangle \\ &\approx \frac{4Z^4e^2}{a^3}\int_0^\rho \left(r - \frac{3r^2}{2\rho} + \frac{r^4}{2\rho^3}\right)dr \\ &= \frac{4Z^4e^2}{a^3}\left(\frac{\rho^2}{2} - \frac{\rho^3}{2\rho} + \frac{\rho^5}{10\rho^3}\right) \\ &= \frac{2Z^4e^2\rho^2}{5a^3} = \frac{2}{5}\frac{e^2}{a}\cdot Z^4\left(\frac{\rho}{a}\right)^2.\end{aligned}$$

(a) Do $e^2/2a = 13,6\,\text{eV}$,

$$\Delta E = \frac{4}{5}\cdot 13,6\cdot Z^4\left(\frac{\rho}{a}\right)^2 = \frac{4}{5}\times 13,6\times 13^2\times(0,88\times 10^{-3})^2 = 1,4\times 10^{-3}\,\text{eV}.$$

(b) Thông qua năng lượng ion hóa của nguyên tử $E_I = \frac{Z^2e^2}{a}$,

$$\Delta E = \frac{2}{5}\frac{Z^2e^2}{a}\left(\frac{Z\rho}{a}\right)^2 = \frac{2}{5}\left(\frac{Z\rho}{a}\right)^2 E_I = 3,1\times 10^{-7}E_I.$$

5030

Người ta đã đưa ra dự án trình bày việc nghiên cứu các tính chất của một nguyên tử cấu thành từ một $\pi^+(m_{\pi^+} = 237,2m_e)$ và một $\mu^-(m_{\mu^-} = 206,77m_e)$ với mục đích để đo bán kính điện của pion. Giả thiết rằng toàn bộ điện tích của pion được phân bố đều trên một vỏ cầu tại $R_0 = 10^{-13}$ cm và μ là một điện tích điểm. Hãy biểu diễn thế năng như tổng thế Coulomb của điện tích điểm và một nhiễu loạn và sử dụng lý thuyết nhiễu loạn để tính giá trị phần trăm dịch chuyển trong hiệu năng lượng Δ giữa các mức 1s và 2p. Bỏ qua các hiệu ứng spin quỹ đạo và dịch chuyển Lamb. Cho trước

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad R_{10}(r) = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2e^{-r/a_0}, \quad R_{21}(r) = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} \frac{e^{-r/a_0}}{\sqrt{3}}.$$

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Thế Coulomb của muon là

$$V = \begin{cases} -\dfrac{e^2}{r} & \text{với } r \geq R, \\ -\dfrac{e^2}{R} & \text{với } r \leq R. \end{cases}$$

Nó có thể được viết dưới dạng

$$V = V_0 + V' = -\frac{e^2}{r} + V',$$

trong đó

$$V' = \begin{cases} 0 & \text{với } r \geq R, \\ \left(\dfrac{1}{r} - \dfrac{1}{R}\right) e^2 & \text{với } r \leq R, \end{cases}$$

được coi như là một nhiễu loạn.

Các mức năng lượng và các hàm sóng của hệ không nhiễu loạn là

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0 n^2}, \quad \psi_n^{(0)} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Do các hiệu ứng spin - quỹ đạo và dịch chuyển Lamb được bỏ qua nên ta chỉ cần xét đến R_{nl} trong các tính toán nhiễu loạn. Như vậy

$$\Delta E_{1s} = e^2 \int_0^\infty R_{10}^2 V' r^2 dr = \frac{4e^2}{a_0^3} \int_0^R e^{-\frac{2r}{a_0}} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\right) r^2 dr,$$

trong đó $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$, m là khối lượng rút gọn của hệ

$$m = \frac{m_\pi m_\mu}{m_\pi + m_\mu} = \frac{\rho m_\mu}{\rho + 1}$$

với

$$\rho = \frac{m_\pi}{m_\mu} = 1,15\,.$$

Như vậy

$$a_0 = \frac{m_e}{m}\left(\frac{\hbar^2}{m_e e^2}\right) = \frac{1}{110,5} \times 0,53 \times 10^{-8} = 4,8 \times 10^{-11}\ \text{cm}\,.$$

Ta thấy $a_0 \gg R$ và hệ số $\exp(-2r/a_0)$ trong tích phân trên có thể bỏ qua. Khi đó, ta có

$$\Delta E_{1s} \approx \frac{4e^2}{a_0^3}\int_0^R \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\right) r^2 dr = \frac{2}{3}\left(\frac{e^2}{a_0}\right)\left(\frac{R}{a_0}\right)^2,$$

$$\Delta E_{2p} \approx \frac{e^2}{24a_0^5}\int_0^R \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\right) r^4 dr = \frac{1}{480}\left(\frac{e^2}{a_0}\right)\left(\frac{R}{a_0}\right)^2.$$

Do đó

$$\frac{\Delta E_{2p} - \Delta E_{1s}}{E_{2p} - E_{1s}} \approx \frac{-\frac{2}{3}\frac{e^2}{a_0}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2}{\frac{e^2}{a_0}\left(-\frac{1}{8} + \frac{1}{2}\right)} = -\frac{16}{9}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2$$

$$= -7,7 \times 10^{-6} = -7,7 \times 10^{-4}\%.$$

5031

Những nguyên tử muon được tạo bởi các meson (khối lượng $m_\mu = 206 m_e$) liên kết với các hạt nhân nguyên tử trên các quỹ đạo hydro. Năng lượng của các mức meson *muy* bị dịch đi so với các giá trị đó trong trường hợp hạt nhân điểm bởi vì điện tích được phân bố trong một vùng bán kính R. Thế Coulomb hiệu dụng có thể tính gần đúng bằng

$$V(r) = \begin{cases} \dfrac{-Ze^2}{r}, & r \geq R, \\ \dfrac{-Ze^2}{R}\left(\dfrac{3}{2} - \dfrac{1}{2}\dfrac{r^2}{R^2}\right), & r \leq R. \end{cases}$$

(a) Hãy nhận xét một cách định tính các mức năng lượng muon $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ sẽ bị dịch đi một cách tuyệt đối và tương đối với nhau như thế nào và giải thích về mặt vật lý những sự khác nhau trong các dịch chuyển đó. Vẽ sơ đồ các mức năng lượng nhiễu loạn và không nhiễu loạn của các trạng thái này.

(b) Đưa ra biểu thức đối với sự thay đổi năng lượng trong gần đúng bậc nhất của trạng thái $1s$ do hạt nhân không còn là điện tích điểm.

(c) Đánh giá độ dịch năng lượng $2s$-$2p$ dưới giả thiết rằng $R/a_\mu \ll 1$, trong đó a_μ là bán kính Bohr đối với muon và chỉ ra rằng từ sự dịch này ta sẽ tính được bán kính R.

(d) Khi nào phương pháp áp dụng trong câu (b) không còn áp dụng được nữa? Phương pháp này cho kết quả thấp hơn hay cao hơn sự dịch năng lượng thực? Giải thích về mặt vật lý câu trả lời của bạn. Sử dụng các dữ kiện sau

$$\psi_{1s} = 2N_0 e^{-r/a_\mu} Y_{00}(\theta, \phi) ,$$

$$\psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{8}} N_0 \left(2 - \frac{r}{a_\mu}\right) e^{-r/2a_\mu} Y_{00}(\theta, \phi) ,$$

$$\psi_{2p} = \frac{1}{\sqrt{24}} N_0 \frac{r}{a_\mu} e^{-r/2a_\mu} Y_{1m}(\theta, \phi) ,$$

trong đó

$$N_0 = \left(\frac{1}{a_\mu}\right)^{3/2} .$$

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Nếu hạt nhân là một hạt điểm với điện tích Ze thì thế năng Coulomb của muon sẽ bằng $V_0 = -\frac{Ze^2}{r}$. Đặt $H' = V - V_0$ và coi nó như là một nhiễu loạn. Vậy Hamiltonian nhiễu loạn của hệ là

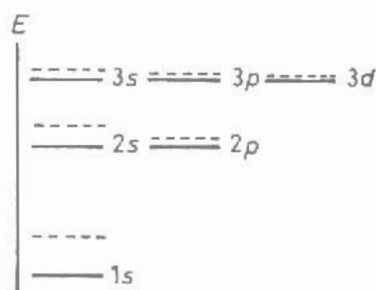
$$H' = \begin{cases} 0, & r \geq R, \\ Ze^2 \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right)\right] , & r \leq R \end{cases}$$

Khi $r < R$, $H' > 0$ và các mức năng lượng dịch lên do nhiễu loạn. Các độ dịch năng lượng của các trạng thái s là lớn hơn so với các trạng thái p và d bởi vì một hạt muon ở trạng thái s có xác suất ở vùng $r \sim 0$ lớn hơn là ở các trạng thái p và d. Bên cạnh đó, nếu số lượng tử l càng lớn thì mômen góc quỹ đạo

tương ứng cũng càng lớn và độ trải rộng của đám mây μ ra xa khỏi tâm cũng càng lớn hơn dẫn đến bổ chính năng lượng cũng nhỏ hơn. Trong Hình 5.12, các đường liền nét mô tả các mức năng lương không nhiễu loạn, trong khi các đường đứt nét biểu diễn các mức năng lượng bị nhiễu loạn. Ta thấy rằng mức năng lượng không bị nhiễu loạn của trạng thái d hầu như trùng với mức bị nhiễu loạn.

(b) Độ dịch năng lượng của trạng thái $1s$ theo nhiễu loạn bậc nhất được tính bởi

$$\Delta E_{1s} = \langle 1s|H'|1s\rangle.$$



Hình 5.12

Do $R \ll a_\mu$, nên ta có thể coi $e^{-r/a_\mu} \approx 1$. Khi đó

$$\Delta E_{1s} \approx \frac{4N_0^2 Ze^2}{4\pi} \int_0^R \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right)\right] 4\pi r^2 dr$$
$$= \frac{2}{5}\left(\frac{R}{a_\mu}\right)^2 \frac{Ze^2}{a_\mu}.$$

(c) Cũng bằng cách đó, ta thu được

$$\Delta E_{2s} \approx \frac{1}{20}\frac{Ze^2}{a_\mu}\left(\frac{R}{a_\mu}\right)^2,$$
$$\Delta E_{2p} \approx 0,$$

và do đó

$$\Delta E_{2s} - \Delta E_{2p} \approx \Delta E_{2s} = \frac{1}{20}\frac{Ze^2}{a_\mu}\left(\frac{R}{a_\mu}\right)^2,$$
$$= \frac{1}{20}\frac{Ze^2}{a_0}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\left(\frac{m_\mu}{m_e}\right)^3,$$

trong đó a_0 là bán kính Bohr. Như vậy, bằng cách đo độ dịch năng lượng ta có thể suy ra được giá trị của R. Hay là nếu ta giả thiết $R = 10^{-13}$ cm, $Z = 5$, thì ta thu được $\Delta E_{2s} - \Delta E_{2p} \approx 2 \times 10^{-2}$ eV.

(d) Trong tính toán ở câu (b) ta đã sử dụng gần đúng $R \ll a_\mu$. Nếu R không nhỏ hơn a_μ quá nhiều thì tính toán đó không còn đúng nữa. Trong trường hợp đó những sự dịch mức thực của các trạng thái p và d lớn hơn các giá trị thu được ở (b) trong khi đó những độ dịch mức của trạng thái s lại nhỏ hơn các giá trị thu được trong (b). Thực tế tính toán trong câu (b) đã đánh giá quá lớn xác suất muon nằm bên trong hạt nhân (mật độ xác suất $\propto |\psi_{1s}(0)|^2$).

5032

(a) Sử dụng một giản đồ năng lượng để cho tập đầy đủ các số lượng tử (mômen lượng toàn phần, spin, tính chẵn lẻ) của trạng thái cơ bản và hai trạng thái kích thích đầu tiên của nguyên tử hêli.

(b) Giải thích định tính vai trò của nguyên lý loại trừ Pauli trong việc xác định nên trật tự của các mức này.

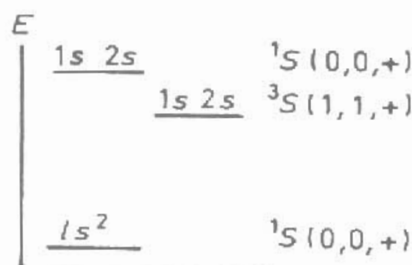
(c) Giả thiết rằng chỉ tồn tại lực tương tác Coulomb và ta đã biết các hàm sóng kiểu hydro $Z = 2$ được kí hiệu là $|1s\rangle$, $|2s\rangle$, $|2p\rangle$, v.v. và các trị riêng năng lượng tương ứng của nguyên tử hydro $Z = 2$ đó là E_{1s}, E_{2s}, E_{2p}, ... Hãy đưa ra các công thức nhiễu loạn để tính năng lượng của các trạng thái hêli này. Không cần tính tích phân nhưng cần giải thích cặn kẽ kí hiệu mô tả kết quả của bạn.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Hình 5.13 cho thấy trạng thái cơ bản và hai trạng thái kích thích đầu tiên của nguyên tử hêli ở các trạng thái para (trái) và ortho (phải) với các số lượng tử (J, S, P).

(b) Nguyên lý loại trừ Pauli đòi hỏi rằng một hệ gồm các electron phải được mô tả bằng một hàm sóng toàn phần có tính phản đối xứng. Đối với hai electron của một nguyên tử hêli, do các trạng thái bội ba có các hàm sóng spin đối xứng nên các hàm sóng không gian phải là phản đối xứng. Cũng như thế, các trạng thái đơn phải có các hàm không gian đối xứng. Trong trường hợp sau, sự xen phủ của các đám mây electron là lớn và khi đó năng lượng đẩy giữa các electron lớn hơn (bởi vì $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ là nhỏ hơn). Do đó, các mức năng lượng tương ứng sẽ cao hơn.



Hình 5.13

(c) Hamiltonian của một nguyên tử hêli là

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

Xét số hạng cuối như là một nhiễu loạn thì bổ chính năng lượng cho trạng thái $|1s1s\rangle$ là

$$\Delta E_{1s} = \left\langle 1s1s \left| \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| 1s1s \right\rangle .$$

Bổ chính năng lượng nhiễu loạn của các trạng thái spin bội ba là

$$\begin{aligned}
\Delta E_{nl}^{(3)} &= \frac{1}{2}\left[(\langle 1snl| - \langle nl1s|)\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}(|1snl\rangle - |nl1s\rangle)\right] \\
&= \frac{1}{2}\left\langle 1snl\left|\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\right|1snl\right\rangle - \frac{1}{2}\left\langle nl1s\left|\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\right|1snl\right\rangle \\
&\quad - \frac{1}{2}\left\langle 1snl\left|\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\right|nl1s\right\rangle + \frac{1}{2}\left\langle nl1s\left|\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\right|nl1s\right\rangle \\
&= \left\langle 1snl\left|\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\right|1snl\right\rangle - \left\langle 1snl\left|\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\right|nl1s\right\rangle .
\end{aligned}$$

Bổ chính năng lượng nhiễu loạn của các trạng thái spin mức đơn là

$$\begin{aligned}
\Delta E_{nl}^{(1)} &= \left\langle 1snl\left|\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\right|1snl\right\rangle \\
&\quad + \left\langle 1snl\left|\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\right|nl1s\right\rangle .
\end{aligned}$$

Số hạng thứ nhất của kết quả trên được gọi là tích phân trực tiếp và số hạng thứ hai gọi là tích phân trao đổi.

5033

Một hạt có khối lượng m tự do nhưng bị giam trên một đường tròn bán kính a. Một thế nhiễu loạn $H = A\sin\theta\cos\theta$ tác dụng vào hạt, trong đó θ là vị trí góc trên đường tròn. Hãy tìm các hàm sóng chính xác bậc không của hai trạng thái thấp nhất của hệ này và tính các năng lượng nhiễu loạn của chúng tới bậc hai.

(Berkeley)

Lời giải:

Các hàm sóng không nhiễu loạn và các năng lượng của hệ tương ứng là

$$\psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\theta} ,$$

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2}{2ma^2} , \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots .$$

Hai trạng thái thấp nhất được kí hiệu bởi $n = \pm 1$, tương ứng với cùng một năng lượng. Tới nhiễu loạn bậc nhất ta tính toán cho các trạng thái suy biến $n = \pm 1$

$$\langle \pm 1|H| \pm 1\rangle = \frac{A}{2\pi}\int_0^{2\pi} \sin\theta\cos\theta d\theta = 0,$$

$$\langle +1|H| - 1\rangle = \frac{A}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-2i\theta}\sin\theta\cos\theta d\theta$$

$$= \frac{A}{4\pi}\int_0^{2\pi} (\cos 2\theta - i\sin 2\theta)\sin 2\theta d\theta$$

$$= \frac{-iA}{4} ,$$

$$\langle -1|H| + 1\rangle = \frac{iA}{4} .$$

Ma trận nhiễu loạn như vậy là

$$\begin{pmatrix} 0 & -\frac{iA}{4} \\ \frac{iA}{4} & 0 \end{pmatrix} .$$

Chéo hóa ta thu được $\Delta E^{(1)} = \pm\frac{A}{4}$. Như vậy, hai hàm sóng không bị triệt tiêu và các giá trị năng lượng tương ứng là

$$\psi_1' = (|-1\rangle + i|1\rangle)/\sqrt{2}, \quad \Delta E_1^{(1)} = \frac{A}{4}.$$

$$\psi_2' = (|1\rangle + i|-1\rangle)/\sqrt{2}, \quad \Delta E_2^{(1)} = -\frac{A}{4}.$$

Tính đến nhiễu loạn bậc hai, bổ chính năng lượng được tính bởi

$$\Delta E^{(2)} = \sum_{n\neq k}{}' \frac{|\langle\psi_k'|H'|n\rangle|^2}{E_k - E_n}.$$

Vì

$$\begin{aligned}
H'|n\rangle &= \frac{A}{2}\sin 2\theta|n\rangle \\
&= \frac{A}{4i}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(e^{i2\theta} - e^{-i2\theta}\right)e^{in\theta} \\
&= \frac{A}{4i}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left[e^{i(n+2)\theta} - e^{i(n-2)\theta}\right] \\
&= \frac{A}{4i}|n+2\rangle - \frac{A}{4i}|n-2\rangle,
\end{aligned}$$

ta có

$$\begin{aligned}
\Delta E_1^{(2)} &= \sum_{n\neq\pm 1}{}' \frac{|\langle\psi_1'|n+2\rangle - \langle\psi_1'|n-2\rangle|^2}{\frac{\hbar^2}{2ma^2}(1-n^2) + \frac{A}{4}} \times \left(\frac{A}{4}\right)^2 \\
&= \frac{\frac{1}{2}}{\frac{\hbar^2}{2ma^2}[1-(-3)^2] + \frac{A}{4}} \times \left(\frac{A}{4}\right)^2 \\
&\quad + \frac{\frac{1}{2}}{\frac{\hbar^2}{2ma^2}(1-3^2) + \frac{A}{4}} \times \left(\frac{A}{4}\right)^2 \\
&\approx -\frac{ma^2A^2}{64\hbar^2}.
\end{aligned}$$

và tương tự $\Delta E_2^{(2)} \approx -\frac{ma^2A^2}{64\hbar^2}$. Do đó

Bởi vậy

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{A}{4} - \frac{ma^2A^2}{64\hbar^2},$$
$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{A}{4} - \frac{ma^2A^2}{64\hbar^2}.$$

5034

Một electron ở khoảng cách x so với bề mặt hêli lỏng cảm nhận một thế năng

$$V(x) = -\frac{K}{x}, \quad x > 0, \quad K = \text{hằng số},$$
$$V(x) = \infty, \quad x \le 0.$$

(a) Hãy tìm mức năng lượng trạng thái cơ bản. Bỏ qua tham số spin.

(b) Sử dụng lý thuyết nhiễu loạn bậc một tính độ dịch Stark ở trạng thái cơ bản.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Tại $x \le 0$, hàm sóng là $\psi(x) = 0$. Tại $x > 0$, phương trình Schrödinger là

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{K}{x}\right)\psi(x) = E\psi(x).$$

Trong trường hợp nguyên tử hydro hàm sóng xuyên tâm $R(r)$ thỏa mãn phương trình

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right]R = ER.$$

Đặt $R(r) = \chi(r)/r$. Đối với $l = 0$, phương trình trở thành

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{e^2}{r}\right)\chi(r) = E\chi(r).$$

Phương trình này về mặt toán học là tương đương với phương trình Schrödinger ở trên và cả hai thỏa mãn cùng điều kiện biên cùng, do đó nghiệm của chúng phải là như nhau (với $r \leftrightarrow x$, $e^2 \leftrightarrow K$).

Do hàm sóng và năng lượng ở trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro tương ứng là

$$E_{10} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\,.$$

$$\chi_{10}(r) = \frac{2r}{a_0^{3/2}}\, e^{-r/a_0} \quad \text{với} \quad a_0 = \hbar^2/me^2\,,$$

nên hàm sóng và năng lượng của bài toán đang xét phải là

$$E_1 = -\frac{mK^2}{2\hbar^2},$$

$$\psi_1(x) = \frac{2}{a^{3/2}}\, xe^{-x/a}, \quad a = \hbar^2/mK.$$

(b) Giả thiết một điện trường ε_e được tác dụng theo phương x. Như vậy, thế nhiễu loạn là $V' = e\varepsilon_e x$ và bổ chính năng lượng bậc nhất cho trạng thái cơ bản trong lý thuyết nhiễu loạn là

$$\begin{aligned}\Delta E_1 &= \langle\psi_1|V'|\psi_1\rangle \\ &= \int_0^\infty \frac{2}{a^{3/2}}\, xe^{-x/a}\cdot e\varepsilon_e x\cdot\frac{2}{a^{3/2}}\, xe^{-x/a}\, dx \\ &= \frac{3}{2}\, e\varepsilon_e a = \frac{3\hbar^2 e\varepsilon_e}{2mK}\,.\end{aligned}$$

5035

Hãy thảo luận và tính toán hiệu ứng Stark cho trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro.

(Berkeley)

Lời giải:

Giả thiết điện trường ngoài nằm theo phương z và xét thế năng của nó như là một nhiễu loạn. Hamiltonian nhiễu loạn của hệ là

$$H' = e\varepsilon\cdot\mathbf{r} = e\varepsilon z\,.$$

Do trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro là không suy biến nên ta có thể áp dụng lý thuyết nhiễu loạn dừng. Đến gần đúng nhiễu loạn bậc nhất, bổ chính năng lượng là

$$E^{(1)} = \langle n=1, l=0, m=0|e\varepsilon z|n=1, l=0, m=0\rangle\,.$$

Đối với nguyên tử hydro tính chẵn lẻ là $(-1)^l$, do đó trạng thái cơ bản ($l = 0$) có tính chẵn. Do z là một toán tử có tính lẻ, nên $E^{(1)} = 0$.

Tính đến gần đúng nhiễu loạn bậc hai, bổ chính năng lượng được tính bởi

$$E^{(2)} = e^2\varepsilon^2 \sum_{\substack{n\neq 1 \\ l\ m}} \frac{|\langle 1,0,0|z|n,l,m\rangle|^2}{E_1 - E_n} .$$

Vì $E_n = E_1/n^2$, trong đó $E_1 = -\frac{e^2}{2a}$, $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$, ta có $E_1 - E_n < 0$, $(n \neq 1)$. Như vậy, bổ chính năng lượng $E^{(2)}$ là âm và có độ lớn tỉ lệ với ε^2. Như vậy, khi tăng cường độ điện trường lên thì sẽ làm giảm mức năng lượng của trạng thái cơ bản. Ta có thể dễ dàng tính tổng trên cho trạng thái cơ bản, lưu ý rằng chỉ có các phần tử ma trận với $l = \pm 1$, $m = 0$ là khác không.

5036

Hãy mô tả và tính toán hiệu ứng Zeeman cho trạng thái $2p$ của nguyên tử hydro.

(Berkeley)

Lời giải:

Sự thay đổi các mức năng lượng của một nguyên tử gây bởi một từ trường đều tác dụng từ bên ngoài được gọi là hiệu ứng Zeeman. Ta sẽ xét sự thay đổi đó ở một nguyên tử hydro tới bậc nhất của cường độ từ trường H. Trước hết ta sẽ bỏ qua mọi tương tác của mômen từ spin của electron với từ trường. Hiệu ứng của spin electron sẽ được thảo luận sau. Một điện tích e trong từ trường ngoài H có Hamiltonian như sau

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + e\phi ,$$

dẫn đến phương trình Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2m}\nabla^2 + \frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}\cdot\nabla + \frac{ie\hbar}{2mc}\nabla\cdot\mathbf{A} + \frac{e^2}{2mc}A^2 + e\phi\right)\psi .$$

Vì $\mathbf{H}$ là đều, nó có thể được biểu diễn dưới dạng thế vectơ

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{H}\times\mathbf{r}$$

do $\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}$. Như vậy, $\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{r} \cdot \nabla \times \mathbf{H} - \mathbf{H} \cdot \nabla \times \mathbf{r}) = 0$ và do đó các số hạng duy nhất chứa $\mathbf{A}$ trong biểu thức Hamiltonian của electron có điện tích e và khối lượng rút gọn μ là

$$-\frac{ie\hbar}{\mu c}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2 = \frac{e}{2\mu c}(\mathbf{H} \times \mathbf{r}) \cdot \mathbf{P} + \frac{e^2}{8\mu c^2}(\mathbf{H} \times \mathbf{r}) \cdot (\mathbf{H} \times \mathbf{r})$$
$$= \frac{e}{2\mu c}\mathbf{H} \cdot \mathbf{L} + \frac{e^2}{8\mu c^2}H^2 r^2 \sin^2\theta,$$

trong đó $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{P}$ và θ là góc giữa $\mathbf{r}$ và $\mathbf{H}$.

Tới bậc nhất của $\mathbf{H}$, ta có thể viết Hamiltonian nhiễu loạn là

$$\hat{H}' = \frac{e}{2\mu c}\mathbf{H} \cdot \mathbf{L}.$$

Lấy phương của từ trường là phương z ta có thể chọn cho các hàm riêng năng lượng của nguyên tử hydro không nhiễu loạn là các trạng thái riêng của L_z với các trị riêng $m\hbar$, trong đó m là số lượng tử từ. Như vậy, bổ chính năng lượng theo nhiễu loạn bậc nhất là

$$W_l' = \langle m|\hat{H}'|m\rangle = \frac{e}{2\mu c}Hm\hbar.$$

Như vậy, suy biến của $2l + 1$ trạng thái ứng với n và l cho trước sẽ bị tách ra theo bổ chính bậc nhất. Đặc biệt, đối với trạng thái $2p$, có $l = 1$, suy biến bậc ba sẽ không còn nữa. Bây giờ chúng ta xét tới ảnh hưởng của spin electron. Electron có một mômen từ riêng theo hướng spin của nó, dẫn đến một toán tử mômen từ $-(e/mc)\mathbf{S}$.

Đối với trường yếu, chúng ta sẽ chỉ xét các hiệu ứng bậc nhất của $\mathbf{H}$. Hamiltonian sẽ là

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + \xi(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \varepsilon(l_z + 2s_z) \quad \text{với} \quad \varepsilon = \frac{eH}{2mc},$$

trong đó từ trường hướng theo trục z.

Ta chọn các hàm riêng của $\mathbf{J}^2$ và J_z sau đây là các hàm sóng

$$^2P_{\frac{3}{2}} \begin{cases} m = \frac{3}{2} & (+)Y_{1,1}, \\ \frac{1}{2} & 3^{-\frac{1}{2}}[2^{\frac{1}{2}}(+)Y_{1,0} + (-)Y_{1,1}], \\ -\frac{1}{2} & 3^{-\frac{1}{2}}[2^{\frac{1}{2}}(-)Y_{1,0} + (+)Y_{1,-1}], \\ -\frac{3}{2} & (-)Y_{1,-1}, \end{cases}$$

$$^2P_{\frac{1}{2}} \begin{cases} m = \dfrac{1}{2} & 3^{-\frac{1}{2}}[-(+)Y_{1,0} + 2^{\frac{1}{2}}(-)Y_{1,1}], \\ -\dfrac{1}{2} & 3^{-\frac{1}{2}}[(-)Y_{1,0} + 2^{\frac{1}{2}}(+)Y_{1,-1}]. \end{cases}$$

$$^2S_{\frac{1}{2}} \begin{cases} m = \dfrac{1}{2} & (+)Y_{0,0}, \\ -\dfrac{1}{2} & (-)Y_{0,0}, \end{cases}$$

trong đó $Y_{0,0}, Y_{1,0}, Y_{1,1}$ và $Y_{1,-1}$ là các hàm cầu điều hòa, $(+)$ và $(-)$ là các hàm sóng spin. Có thể chứng tỏ rằng năng lượng từ $\varepsilon(l_z + 2s_z) = \varepsilon(J_z + s_z)$ có các phần tử ma trận khác không giữa các trạng thái có j khác nhau nhưng không có phần tử ma trận nào khác không giữa các trạng thái có cùng giá trị j đồng thời có m khác nhau. Chúng ta có thể bỏ qua các trạng thái có j khác nhau bởi vì sự chênh lệch năng lượng giữa chúng là lớn. Như vậy, năng lượng từ được chéo hóa theo m đối với từng giá trị của j và nó làm dịch năng lượng của mỗi một trạng thái trên thông qua giá trị kì vọng của trạng thái đó. Trong từng trường hợp J_z được chéo hóa và giá trị kì vọng của nó là $m\hbar$. Ví dụ giá trị kì vọng của s_z đối với trạng thái $P_{3/2}$ với $m = 1/2$ là

$$\iint 3^{-\frac{1}{2}}[2^{\frac{1}{2}}(+)^\dagger Y^*_{1,0} + (-)^\dagger Y^*_{1,1}] \frac{1}{2}\hbar\sigma_z 3^{-\frac{1}{2}}[2^{\frac{1}{2}}(+)Y_{1,0} + (-)Y_{1,1}] \sin\theta d\theta d\phi$$
$$= \frac{\hbar}{6}\iint [2^{\frac{1}{2}}(+)^\dagger Y^*_{1,0} + (-)^\dagger Y^*_{1,1}]\,[2^{\frac{1}{2}}(+)Y_{1,0} - (-)Y_{1,1}] \sin\theta d\theta d\phi$$
$$= \frac{\hbar}{6}(2-1) = \frac{\hbar}{6}.$$

Như vậy, năng lượng từ của trạng thái này là $\varepsilon\hbar\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{6}\right) = \frac{2}{3}\varepsilon\hbar$.

Kết quả này và các kết quả tương tự cho các trạng thái khác được biểu diễn dưới dạng thừa số Landé g là $\varepsilon m\hbar g$, với

$$g = \frac{4}{3} \quad \text{đối với} \quad {}^2P_{3/2}, \quad g = \frac{2}{3} \quad \text{đối với} \quad {}^2P_{1/2}, \quad g = 2 \quad \text{đối với} \quad {}^2S_{1/2}.$$

5037

Hãy giải thích tại sao các trạng thái kích thích của nguyên tử hydro có thể thể hiện hiệu ứng Stark tuyến tính trong một điện trường, nhưng các trạng

thái kích thích của nguyên tử natri lại chỉ thể hiện hiệu ứng bậc hai.

(*MIT*)

Lời giải:

Thế năng của electron của nguyên tử trong điện trường ngoài **E** là

$$H' = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}.$$

Nếu ta làm phép thế $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ trong tích phân $\langle l'|H'|l\rangle$, do giá trị tích phân không thay đổi nên ta có

$$\begin{aligned}\langle l'|H'|l\rangle(\mathbf{r}) &= \langle l'|H'|l\rangle(-\mathbf{r}) \\ &= (-1)^{l'+l+1}\langle l'|H'|l\rangle(\mathbf{r}).\end{aligned}$$

Điều này có nghĩa là nếu các trạng thái l' và l có cùng tính chẵn lẻ (nghĩa là l' và l có thể cùng lẻ hoặc cùng chẵn) thì ta phải có $\langle l'|H'|l\rangle = 0$.

Nếu điện trường không quá yếu, chúng ta không cần tính đến cấu trúc tinh tế của phổ nguyên tử gây ra bởi spin của electron. Trong những trường hợp như vậy, một trạng thái kích thích của nguyên tử hydro sẽ là sự chồng chất của các trạng thái với tính chẵn lẻ khác nhau, nghĩa là có sự suy biến theo l và ta phải dùng đến lý thuyết nhiễu loạn cho các trạng thái suy biến. Do có những yếu tố khác không trong ma trận Hamiltonian nhiễu loạn, những trạng thái kích thích của nguyên tử hydro có thể cho thấy một hiệu ứng Stark tuyến tính.

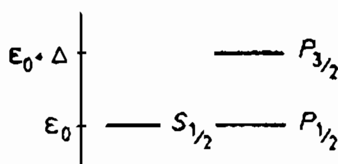
Đối với các trạng thái kích thích của nguyên tử natri, mỗi mức năng lượng đều tương ứng với một chẵn lẻ xác định, nghĩa là không có suy biến theo l. Khi xem xét nó bằng lý thuyết nhiễu loạn không suy biến, bổ chính bậc nhất cho năng lượng $\langle l'|H'|l\rangle$ sẽ bằng không. Khi đó, ta phải tính bổ chính năng lượng bậc hai. Như vậy, các trạng thái kích thích của nguyên tử natri chỉ cho thấy hiệu ứng Stark bậc hai.

5038

Hiệu ứng Stark. Những mức năng lượng của các trạng thái tương ứng với $n = 2$ của nguyên tử hydro được minh họa trong Hình 5.14.

Các mức $S_{1/2}$ và $P_{1/2}$ là suy biến ở năng lượng ε_0 còn mức $P_{3/2}$ là suy biến ở năng lượng là $\varepsilon_0 + \Delta$.

Một điện trường tĩnh đồng nhất E khi tác động lên nguyên tử sẽ làm dịch chuyển các trạng thái đến các năng lượng ε_1, ε_2 và ε_3. Giả sử rằng, tất cả các



Hình 5.14

trạng thái khác, trừ ba trạng thái nói trên, là đủ xa và có thể bỏ qua, hãy xác định các năng lượng ε_1, ε_2 và ε_3 đến bậc hai đối với điện trường E.

(*Princeton*)

Lời giải:

Giả sử các yếu tố ma trận của Hamiltonian nhiễu loạn $H' = -e\mathbf{E}\cdot\mathbf{r}$ là

	$P_{3/2}$	$P_{1/2}$	$S_{1/2}$
$P_{3/2}$	0	0	b
$P_{1/2}$	0	0	a
$S_{1/2}$	b^*	a^*	0

vì $\langle l'|H'|l\rangle = 0$ đối với các trạng thái l', l có cùng tính chẵn lẻ (**Bài tập 5037**). Khi đó, đối với mức năng lượng $P_{3/2}$, ta có

$$E_{P3/2} = E^{(0)}_{P3/2} + \frac{|\langle P_{3/2}|H'|S_{1/2}\rangle|^2}{E^{(0)}_{P3/2} - E^{(0)}_{S1/2}}$$

$$= \varepsilon_0 + \Delta + \frac{|b|^2}{\Delta}.$$

Đối với các mức năng lượng $P_{1/2}$ và $S_{1/2}$, ta sẽ chéo hóa Hamiltonian trong không gian con tương ứng, nghĩa là, giải

$$\begin{vmatrix} -\lambda & a \\ a^* & -\lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Các nghiệm là $\lambda = \pm|a|$, và chúng sẽ cho các hàm sóng mới

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{a}{|a|}|P_{1/2}\rangle + |S_{1/2}\rangle\right) = \frac{a|P_{1/2}\rangle + |a||S_{1/2}\rangle}{\sqrt{2}|a|},$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{a}{|a|}|P_{1/2}\rangle + |S_{1/2}\rangle\right) = \frac{-a|P_{1/2}\rangle + |a||S_{1/2}\rangle}{\sqrt{2}|a|},$$

với năng lượng

$$\begin{aligned} E_1 &= E_1^{(0)} + |a| + \frac{\langle 1|H'|P_{3/2}\rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_{P3/2}^{(0)}} \\ &= \varepsilon_0 + |a| + \frac{|b|^2}{2(-\Delta)} \\ &= \varepsilon_0 + |a| - \frac{|b|^2}{2\Delta}, \\ E_2 &= E_2^{(0)} - |a| + \frac{|\langle 2|H'|P_{3/2}\rangle|^2}{E_2^{(0)} - E_{P3/2}^{(0)}} \\ &= \varepsilon_0 - |a| - \frac{|b|^2}{2\Delta}. \end{aligned}$$

5039

Hiệu ứng Stark trong các nguyên tử (sự tách các mức năng lượng bởi điện trường đều) thường quan sát thấy là bậc hai đối với cường độ trường. Hãy giải thích tại sao. Nhưng đối với một số trạng thái của nguyên tử hydro, hiệu ứng Stark lại quan sát thấy có dạng tuyến tính đối với cường độ trường. Hãy giải thích tại sao. Bằng cách thực hiện tính toán nhiễu loạn cho hiệu ứng Stark đối với trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích đầu tiên đến bậc khác không thấp nhất cho nguyên tử hydro để minh họa điều đó.

Bỏ qua thừa số không có ý nghĩa vật lý, lấy các hàm sóng là

$$\begin{aligned} \psi_{100} &= 4\sqrt{2}a_0 e^{-r/a_0}, \\ \psi_{200} &= (2a_0 - r)\, e^{-r/2a_0}, \\ \psi_{21\pm1} &= \pm\, r e^{-r/2a_0} \sin\theta e^{\pm i\phi}/\sqrt{2}, \\ \psi_{210} &= r e^{-r/2a_0} \cos\theta. \end{aligned}$$

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Mômen lưỡng cực điện của một hệ nguyên tử với một số electron là

$$\mathbf{d} = -\sum_j e_i \mathbf{r}_i$$

Nói chung, các mức năng lượng không có suy biến nào khác trừ suy biến đối với l_z. Năng lượng phụ thuộc vào các số lượng tử n và l. Vì Hamiltonian nhiễu loạn $H' = -\mathbf{d}\cdot\mathbf{E}$ là một toán tử lẻ, nên chỉ những yếu tố giữa các trạng thái có tính chẵn lẻ trái nhau mới khác không. Vì vậy, giá trị trung bình ở bất cứ trạng thái cho trước nào cũng bằng không, nghĩa là,

$$\langle nlm| - \mathbf{d}\cdot\mathbf{E}|nlm'\rangle = 0\,.$$

Điều này kéo theo bổ chính năng lượng bậc nhất luôn luôn bằng không và cần phải xét đến bổ chính năng lượng tới bậc hai nhiễu loạn. Do đó, bổ chính năng lượng tỉ lệ với E^2.

Riêng đối với nguyên tử hydro, sự suy biến xảy ra với các mức có cùng n nhưng có l khác nhau. Vì thế không phải tất cả các yếu tố ma trận $\langle nl'|H'|nl\rangle$ giữa các trạng thái như vậy đều bằng không. Cho nên sự chuyển dịch các mức năng lượng dưới tác động của nhiễu loạn (suy biến) bậc nhất có thể khác không, và hiệu ứng Stark là hàm tuyến tính của điện trường E. Ta sẽ viết Hamiltonian nhiễu loạn trong tọa độ cầu, lấy trục z là phương của $\mathbf{E}$. Do $H' = eEz = eEr\cos\theta$, và trạng thái cơ bản không suy biến có hàm sóng

$$\psi_{100} = 4\sqrt{2}a_0 e^{-r/a_0}\,,$$

và do đó (**Bài tập 5037**)

$$V^{(1)} = \langle 100|H'|100\rangle = 0\,.$$

Bổ chính năng lượng bậc hai là

$$\begin{aligned} V^{(2)} &= \sum_{n\neq 1}{}' \frac{|H'_{n0}|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}} \\ &= e^2E^2\sum_{n=2}^{\infty}\frac{|\langle nl0|z|100\rangle|^2}{\left(1-\dfrac{1}{n^2}\right)\dfrac{e^2}{2a}} \\ &= 2aE^2\cdot\frac{9}{8}a^2 = \frac{9}{4}a^3E^2\,. \end{aligned}$$

Chú ý rằng để $H'_{n0} \neq 0$ cần phải có $\Delta l = \pm 1$.

Trạng thái kích thích đầu tiên $n = 2$ là suy biến bội bốn, các hàm sóng là

$$\psi_{200},\ \psi_{210},\ \psi_{21,\pm 1}\,.$$

Bởi vì

$$eE\langle n, l+1, m|z|n, l, m\rangle = -eE\sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} \cdot \frac{3a_0 n}{2}\sqrt{n^2 - l^2}$$
$$= -3eEa_0$$

là những yếu tố duy nhất khác không của H' đối với $n = 2$, ta có phương trình trường kì

$$|H' - E^{(1)}I| = \begin{vmatrix} -E^{(1)} & -3eEa_0 & 0 & 0 \\ -3eEa_0 & -E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0\,.$$

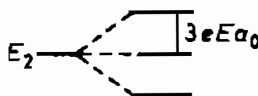
nó sẽ cho các bổ chính năng lượng

$$E^{(1)} = \pm 3eE_a, 0, 0\,.$$

Như vậy, mức năng lượng tương ứng với $n = 2$ sẽ được tách thành

$$-\frac{e^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{2^2} + 3eEa_0\,,$$
$$-\frac{e^2}{8a_0} - 3eEa_0\,,$$

trong đó a_0 là bán kính Bohr $\frac{\hbar^2}{me^2}$. Việc tách mức của trạng thái kích thích $n = 2$ được thể hiện trong Hình 5.15. Chú ý rằng, hai trạng thái khác vẫn còn suy biến.



Hình 5.15

5040

Xét một nguyên tử bị ion hóa (Z, A) chỉ còn lại một electron duy nhất. Hãy tính sự tách mức Zeeman của trạng thái $n = 2$ trong một từ trường yếu

(a) đối với một electron.

(b) đối với một hạt giả định spin = 0 với khối lượng như electron.

(c) Tính hiệu ứng Stark bậc nhất (các mức năng lượng và hàm sóng) đối với một electron ở trạng thái $n = 2$.

(Sau khi đã thiết lập các tích phân theo bán kính, bạn có thể biểu diễn số hạng đó như một tham số mà không cần phải tính. Cũng làm như vậy đối với những tích phân khác không theo biến góc).

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Chọn phương của từ trường ngoài làm trục z. Đối với trường hợp một electron và từ trường ngoài yếu, so với hiệu ứng của nó, hiệu ứng của tương tác spin quỹ đạo là không thể bỏ qua, và tương tác này gây nên hiệu ứng Zeeman dị thường. Hamiltonian của hệ

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} + \frac{eB}{2m_e c}(\hat{l}_z + 2\hat{s}_z) + \xi(r)\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{l}}$$

có thể viết dưới dạng

$$\hat{H} = H_0 + \frac{eB}{2m_e c}\hat{j}_z + \frac{eB}{2m_e c}\hat{s}_z ,$$

với

$$H_0 \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} + \xi(r)\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{l}}, \quad \hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z .$$

Trước khi có từ trường, ta có

$$H_0\psi_{nljm_j} = E_{nlj}\psi_{nljm_j} \cdot \left(j = l \pm \frac{1}{2}\right)$$

Nếu có thể bỏ qua số hạng $\frac{eB}{2m_e c}\hat{s}_z$, thì $(\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{j}_z)$ vẫn còn là các đại lượng bảo toàn. Khi đó $\langle jm_j|\hat{j}_z|jm_j\rangle = m_j\hbar$ và năng lượng của hệ là

$$E_{nlj} + m_j\hbar\omega_L ,$$

trong đó

$$\omega_L = \frac{eB}{2m_e c} .$$

Khi có từ trường yếu, đóng góp của số hạng $\frac{eB}{2m_e c}\hat{s}_z$ là (**Bài tập 5057**)

$$\begin{aligned}\omega_L \bar{s}_z &= \frac{\hbar\omega_L}{2}\langle jm_j|\hat{\sigma}_z|jm_j\rangle \\ &= \begin{cases} \dfrac{m_j}{2j}\hbar\omega_L, & j = l + \frac{1}{2}, \\ -\dfrac{m_j}{2j+2}\hbar\omega_L, & j = l - \frac{1}{2}. \end{cases}\end{aligned}$$

Do đó

$$E_{nljm_j} = E_{nlj} + \begin{cases} \left(1 + \dfrac{1}{2j}\right) m_j\hbar\omega_L, & j = l + \frac{1}{2}, \\ \left(1 - \dfrac{1}{2j+2}\right) m_j\hbar\omega_L. & j = l - \frac{1}{2}. \end{cases}$$

Với $n = 2$, ta có

$$\begin{cases} E_{20\,\frac{1}{2}\,m_j} = E_{20\,\frac{1}{2}} + 2m_j\hbar\omega_L, & m_j = \pm\frac{1}{2}, \\ E_{21\,\frac{3}{2}\,m_j} = E_{21\,\frac{3}{2}} + \dfrac{4}{3}m_j\hbar\omega_L, & m_j = \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}, \\ E_{21\,\frac{1}{2}\,m_j} = E_{21\,\frac{1}{2}} + \dfrac{2}{3}m_j\hbar\omega_L, & m_j = \pm\frac{1}{2}. \end{cases}$$

(b) Khi spin bằng 0, sẽ không có các hiệu ứng liên quan đến spin, cho nên

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + V(r) + \frac{eB}{2m_e c}\hat{l}_z .$$

Hàm riêng sẽ là

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nlm}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi),$$

và giá trị riêng năng lượng là

$$E_{nlm} = E_{nl} + \frac{eB}{2m_e c}m\hbar .$$

Với $n = 2$,

$$\begin{aligned} E_{200} &= E_{20}, \\ E_{210} &= E_{21}, \\ E_{21,\pm1} &= E_{21} \pm \frac{eB}{2m_e c}\hbar . \end{aligned}$$

(c) Xem lời giải của **Bài tập 5042**.

5041

Stark chỉ ra bằng thực nghiệm rằng, khi đặt vào điện trường ngoài yếu và đồng nhất, sự suy biến bội bốn của mức năng lượng $n = 2$ của nguyên tử hydro có thể sẽ bị khử. Hãy nghiên cứu hiệu ứng đó bằng phương pháp nhiễu loạn, bỏ qua các hiệu ứng spin và tương đối tính.

Đặc biệt:

(a) Tìm biểu thức cho bổ chính bậc nhất đối với năng lượng (không cần thực hiện tích phân theo bán kính)

(b) Có suy biến nào còn sót lại không?

(c) Vẽ một sơ đồ mức năng lượng cho $n = 2$, qua đó chỉ ra các mức trước và sau khi có điện trường. Mô tả những vạch quang phổ vốn thuộc mức năng lượng đó mà bây giờ có thể quan sát được.

(*Chicago*)

Lời giải:

Viết Hamiltonian của hệ dưới dạng $H = H_0 + H'$, trong đó

$$H_0 = -\frac{e^2}{r} + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} ,$$

$$H' = eEz ,$$

lấy trục z là phương của điện trường **E**. Đối với một điện trường yếu, $H' \ll H_0$ và ta coi H' như là một nhiễu loạn.

Gọi (0,0), (1,0), (1,1) và (1,-1) là bốn hàm riêng suy biến (l, m) của trạng thái $n = 2$ của nguyên tử hydro.

Ma trận diễn tả H' trong không gian con đó là

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & \langle 0,0|H'|1,0\rangle & 0 & 0 \\ \langle 1,0|H'|0,0\rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} ,$$

trong đó

$$\begin{aligned}\langle 1,0|H'|0,0\rangle &= \langle 0,0|H'|1,0\rangle^* \\ &= eE\int u_{210}^*(r)r\cos\theta u_{200}(r)d^3r \\ &= -3eEa_0, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}\end{aligned}$$

là bán kính Bohr. Lưu ý rằng $\langle l'|H'|l\rangle = 0$ trừ trường hợp các trạng thái l', l có tính chẵn lẻ ngược nhau.

Giải phương trình trường kì

$$\begin{vmatrix} -w_1 & \langle 0,0|H'|1,0\rangle & 0 & 0 \\ \langle 1,0|H'|0,0\rangle & -w_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -w_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -w_1 \end{vmatrix} = 0,$$

ta thu được bốn nghiệm

$$\begin{aligned} w_1^{(1)} &= 3eEa_0, \\ w_1^{(2)} &= w_1^{(3)} = 0, \\ w_1^{(4)} &= -3eEa_0. \end{aligned}$$

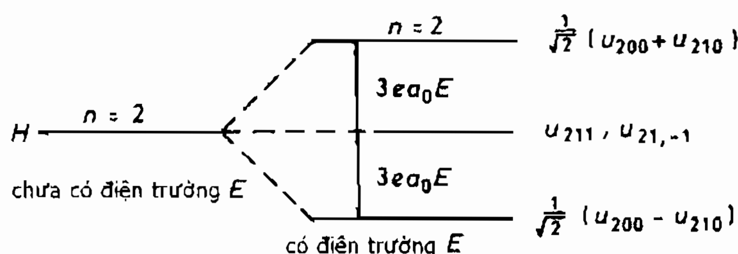
(a) Như vậy, bổ chính bậc nhất cho năng lượng là

$$\Delta E = w_1 = \begin{cases} 3eEa_0, \\ 0, \\ 0, \\ -3eEa_0. \end{cases}$$

(b) Vì $\omega_1^{(2)} = \omega_1^{(3)} = 0$, nên vẫn còn một suy biến bội hai.

(c) Hình 5.16 mô tả các mức năng lượng ứng $n = 2$. Quy tắc lọc lựa cho sự chuyển dời gây bởi lưỡng cực điện là $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0, \pm 1$, và ta có hai vạch quang phổ

$$\begin{aligned} h\nu_1 &= 3ea_0E, \quad \nu_1 = 3ea_0E/h; \\ h\nu_2 &= 2\times 3ea_0E, \quad \nu_2 = 6ea_0E/h. \end{aligned}$$



Hình 5.16

5042

Xét các mức $n = 2$ của nguyên tử tựa hydro. Giả sử spin của hạt quay quanh hạt nhân bằng không. Bỏ qua hiệu ứng tương đối tính.

(a) Hãy tính đến bậc thấp nhất sự tách mức năng lượng khi có mặt một từ trường đều.

(b) Cũng hỏi như trên đối với trường hợp có một điện trường đều.

(c) Cũng hỏi như trên khi cả hai trường cùng có mặt và có phương vuông góc với nhau.

(Mọi tích phân theo bán kính đều không cần tính; nó được coi là một tham số đối với những tính toán còn lại. Với tích phân theo biến góc cũng được làm như vậy khi biết nó chắc chắn là khác không).

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Chọn chiều của từ trường làm trục z. Khi đó, Hamiltonian của hệ có dạng

$$H = \frac{1}{2m_e}\mathbf{p}^2 + V(r) + \frac{eB}{2m_e c}\hat{l}_z\,,$$

trong đó $V(r) = -\frac{e^2}{r}$. Coi $H' = \frac{eB}{2m_e c}\hat{l}_z$ là nhiễu loạn, hàm riêng đối với các trạng thái không nhiễu loạn là

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)\,,$$

với $n = 1, 2, 3, \ldots, \quad l = 0, 1, 2, \ldots, n-1\,.$

$$m = -l, -l+1, \ldots l-1, l\,.$$

Do (H, l^2, l_z) vẫn là các đại lượng bảo toàn, $\langle nlm|\hat{l}_z|nlm\rangle = mh$ và sự tách

mức năng lượng tới bậc nhất đối với $n = 2$ là

$$E_{2lm} = E_{2l} + \frac{eB}{2m_e c} m\hbar$$

$$= \begin{cases} E_{20}, & l = 0\,; \\ E_{21} + \begin{cases} \dfrac{eB}{2m_e c}\hbar, \\ 0, \\ \dfrac{-eB}{2m_e c}\hbar, \end{cases} & l = 1 \begin{cases} m = 1, \\ m = 0, \\ m = -1. \end{cases} \end{cases}$$

(b) Mức năng lượng $n = 2$ khi không xét đến spin là suy biến bội bốn. Năng lượng và hàm sóng trạng thái tương ứng là

$$E_2 = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0}\frac{1}{2^2}, \quad \psi_{200}, \psi_{210}, \psi_{211}, \psi_{21-1}.$$

Giả sử có một điện trường đều đặt dọc theo trục z. Coi $H' = e\varepsilon z = E_0 V'$ là nhiễu loạn, trong đó $E_0 = e\varepsilon a_0$, $V' = z/a_0 = r\cos\theta/a_0$, $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_r e^2}$. Vì

$$\cos\theta Y_{lm} = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}}\, Y_{l+1,m} + \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)}}\, Y_{l-1,m},$$

nên $H'_{nl'm',nlm} \neq 0$ chỉ khi $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0$. Do đó, các yếu tố khác không của ma trận nhiễu loạn là

$$(H')_{200,210} = \int \psi^*_{200} H' \psi_{210} d^3\mathbf{x} = \int \psi_{200} H' \psi_{210} d^3\mathbf{x},$$

$$(H')_{210,200} = \int \psi^*_{210} H' \psi_{200} d^3\mathbf{x} = \int \psi_{210} H' \psi_{200} d^3\mathbf{x}.$$

Đặt $(H')_{200,210} = (H')_{210,200} = E'$, nghĩa là, $H_{01} = H_{10} = E'$, và giải phương trình trường kì

$$\det |H_{\mu\nu} - E^{(1)}\delta_{\mu\nu}| = 0.$$

Các nghiệm là $E^{(1)} = \pm E', 0, 0$. Do đó, trạng thái năng lượng $n = 2$ được tách thành ba mức

$$E_2 \pm E', E_2 \qquad \text{(suy biến bội hai đối với } E_2) .$$

(c) Giả sử từ trường là dọc theo trục z và điện trường là dọc theo trục x, Hamiltonian nhiễu loạn của hệ sẽ là

$$H' = \frac{eB}{2m_e c}\hat{l}_z + e\varepsilon x = \beta l_z/\hbar + \sqrt{2}\gamma x/3a ,$$

trong đó

$$\beta = eB\hbar/2m_e c, \ \gamma = 3e\varepsilon a/\sqrt{2}, \ a = a_0/Z .$$

Các yếu tố khác không của ma trận x là

$$(x)^{l-1,m}_{l,m-1} = (\mathbf{x})^{l,m-1}_{l-1,m} = \frac{3}{4}n\sqrt{\frac{(n^2-l^2)(l-m+1)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}\,a ,$$

$$(x)^{l,m}_{l-1,m-1} = (x)^{l-1,m-1}_{l,m} = -\frac{3}{4}n\sqrt{\frac{(n^2-l^2)(l+m-1)(l+m)}{(2l+1)(2l-1)}}\,a .$$

Cho nên, với $n = 2$,

$$x^{11}_{00} = -\frac{3}{\sqrt{2}}a = x^{00}_{11} ,$$

$$x^{00}_{1-1} = \frac{3}{\sqrt{2}}a = x^{1-1}_{00} ,$$

và ma trận nhiễu loạn là

$$\begin{matrix} \left.\begin{matrix} l=1 \\ m=1 \end{matrix}\right\} \\ \left.\begin{matrix} l=1 \\ m=0 \end{matrix}\right\} \\ \left.\begin{matrix} l=1 \\ m=-1 \end{matrix}\right\} \\ \left.\begin{matrix} l=0 \\ m=0 \end{matrix}\right\} \end{matrix} \begin{pmatrix} \beta & 0 & 0 & -\gamma \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\beta & \gamma \\ -\gamma & 0 & \gamma & 0 \end{pmatrix}$$

Phương trình trường kì

$$\det\begin{vmatrix} \beta - E^{(1)} & 0 & -\gamma \\ 0 & -\beta - E^{(1)} & \gamma \\ -\gamma & \gamma & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

có các nghiệm

$$E_1^{(1)} = 0,\ E_{2,3}^{(1)} = \pm\sqrt{\beta^2 + 2\gamma^2}\,.$$

Do đó, mức năng lượng $n = 2$ được tách thành ba mức với năng lượng

$$E_2,\, E_2 + \sqrt{\beta^2 + 2\gamma^2}\,.$$

5043

Một nguyên tử hydro phi tương đối tính, với một electron không có spin, được đặt vào một điện trường $\mathcal{E}$ có phương dọc theo trục z và một từ trường $\mathcal{H}$ có phương dọc theo trục x. Hiệu ứng của hai trường đối với các mức năng lượng là cỡ ngang nhau.

(a) Nếu nguyên tử nằm trong trạng thái với số lượng tử chính n, hãy chỉ ra những yếu tố ma trận nào trong tính toán nhiễu loạn bậc nhất của dịch chuyển năng lượng là bằng không.

(b) Hãy tìm một phương trình cho dịch chuyển năng lượng; một khi đã có phương trình dưới dạng định thức, bạn không cần sử dụng phương pháp đại số để tính định thức đó. Không cần đưa biểu thức chính xác của hàm sóng xuyên tâm, hãy biểu diễn kết quả của bạn qua các yếu tố ma trận của r^n (trong đó n là lũy thừa thích hợp) giữa các hàm sóng xuyên tâm. Cho:

$$(\ell_x \pm i\ell_y)|\ell, m\rangle = \sqrt{\{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)\}}\,|\ell, m \pm 1\rangle\,.$$

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Hamiltonian nhiễu loạn là

$$H' = \frac{eB}{2mc}\hat{l}_x + e\varepsilon\hat{z}\,.$$

Gọi những vectơ trạng thái khi $n = 2$ là $|200\rangle$, $|210\rangle$, $|211\rangle$, $|21,-1\rangle$. Bởi vì

$$(\ell_x \pm i\ell_y)|\ell, m\rangle = \sqrt{\{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)\}}\,|\ell, m \pm 1\rangle\,,$$

ta có

$$\hat{l}_x|0,0\rangle = 0,\ \hat{l}_x|1,1\rangle = \hat{l}_x|1,-1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar|1,0\rangle\,,$$

$$\hat{l}_x|1,0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\{|1,1\rangle + |1,-1\rangle\}\,.$$

Bởi vì $z = r\cos\theta$, ta có

$$\langle 210|r\cos\theta|200\rangle = \langle 200|r\cos\theta|210\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\langle r\rangle$$

với $\langle r\rangle = \int_0^\infty r^3 R_{20}R_{21}dr$, những yếu tố ma trận khác của z bằng không. Do đó, ma trận nhiễu loạn là

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{3}}e\varepsilon\langle r\rangle & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}e\varepsilon\langle r\rangle, & 0 & \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc} & \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

(b) Phương trình trường kì $|H - \lambda\mathbf{I}| = 0$, hay

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \alpha & 0 & 0 \\ \alpha & -\lambda & \beta & \beta \\ 0 & \beta & -\lambda & 0 \\ 0 & \beta & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = 0\,,$$

trong đó $\alpha = \sqrt{\frac{1}{3}}e\varepsilon\langle r\rangle$, $\beta = \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc}$, có nghiệm là $\lambda = 0, 0, \pm\sqrt{2\beta^2 + \alpha^2}$, và đó chính là các dịch chuyển năng lượng. Chú ý rằng một suy biến bội hai vẫn còn sót lại.

5044

Hai hạt không đồng nhất, mỗi hạt đều có khối lượng m, được nhốt vào trong hộp một chiều có thành không xuyên qua được và có độ dài bằng L.

Hãy tìm các hàm sóng và năng lượng của ba trạng thái thấp nhất của hệ (nghĩa là, trong đó nhiều nhất chỉ có một hạt bị kích thích ra khỏi trạng thái cơ bản). Nếu một thế tương tác có dạng $V_{12} = \lambda\delta(x_1 - x_2)$ được đặt thêm vào, hãy tính đến bậc nhất theo λ, các năng lượng của ba trạng thái thấp nhất đó và hàm sóng của chúng đến bậc không theo λ.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Cả hai hạt đều có thể ở trạng thái cơ bản, bởi vì chúng không phải là những hạt đồng nhất. Năng lượng và hàm sóng tương ứng sẽ là

$$E_{11} = \frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}, \quad \psi_{11} = \frac{2}{L}\sin\frac{\pi x_1}{L}\sin\frac{\pi x_2}{L}.$$

Nếu một hạt ở trạng thái cơ bản, hạt kia ở trạng thái kích thích đầu tiên, năng lượng và hàm sóng tương ứng sẽ là

$$E_{12} = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2mL^2}, \quad \psi_{12} = \frac{2}{L}\sin\frac{\pi x_1}{L}\sin\frac{2\pi x_2}{L},$$

$$E_{21} = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2mL^2}, \quad \psi_{21} = \frac{2}{L}\sin\frac{2\pi x_1}{L}\sin\frac{\pi x_2}{L}.$$

Khi cả hai hạt đều ở trạng thái cơ bản đơn hạt, nghĩa là hệ ở trạng thái cơ bản, ta có bổ chính năng lượng

$$E^{(1)} = (\psi_{11}, V_{12}\psi_{11}) = \frac{4}{L^2}\lambda\int_0^L \sin^4\left(\frac{\pi x_1}{L}\right)dx_1 = \frac{3\lambda}{2L},$$

và hàm sóng ở gần đúng bậc không đối với λ sẽ là

$$\phi_{11} = \psi_{11}.$$

Khi một hạt ở trạng thái cơ bản còn hạt kia ở trạng thái kích thích đầu tiên, mức năng lượng sẽ suy biến bội hai và ta phải dùng lý thuyết nhiễu loạn cho các trạng thái suy biến. Trước hết, ta phải tính yếu tố ma trận của Hamiltonian nhiễu loạn

$$\iint \psi_{12}^* V_{12}\psi_{12}dx_1dx_2 = \iint \psi_{21}^* V_{12}\psi_{21}dx_1dx_2$$

$$= \frac{4}{L^2}\lambda\int_0^L \sin^2\frac{\pi x_1}{L}\sin^2\frac{2\pi x_1}{L}dx_1 = \frac{\lambda}{L},$$

$$\iint \psi_{12}^* V_{12}\psi_{21}dx_1dx_2 = \iint \psi_{21}^* V_{12}\psi_{12}dx_1dx_2 = \frac{\lambda}{L}.$$

Sau đó, giải phương trình trường kì

$$\det\begin{vmatrix} \frac{\lambda}{L} - E^{(1)} & \frac{\lambda}{L} \\ \frac{\lambda}{L} & \frac{\lambda}{L} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0,$$

và thu được các nghiệm

$$E_+^{(1)} = \frac{2\lambda}{L}, \quad E_-^{(1)} = 0,$$

và đó cũng chính là các bổ chính năng lượng. Hàm sóng bậc không tương ứng là

$$\phi_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12} \pm \psi_{21}).$$

5045

Xét một hệ ba mức được mô tả bằng Hamiltonian

$$H = H_0 + \lambda H_1,$$

trong đó λ là một số thực. Các trạng thái riêng của H_0 là $|1\rangle$, $|2\rangle$ và $|3\rangle$, và

$$H_0|1\rangle = 0,$$
$$H_0|2\rangle = \Delta|2\rangle,$$
$$H_0|3\rangle = \Delta|3\rangle.$$

(a) Hãy viết ma trận 3×3 tổng quát nhất diễn tả H_1 trong hệ cơ sở $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$.

(b) Khi tính phổ cho H bằng lý thuyết nhiễu loạn, ta thấy rằng, các trạng thái riêng của H với bậc thấp nhất của λ là $|1\rangle, |\pm\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle \pm |3\rangle)$ và các giá trị riêng tương ứng là

$$E_1 = -\frac{\lambda^2}{\Delta} + O(\lambda^3),$$
$$E_+ = \Delta + \lambda + \frac{\lambda^2}{\Delta} + O(\lambda^3),$$
$$E_- = \Delta - \lambda + O(\lambda^3).$$

Hãy xác định càng nhiều càng tốt các yếu tố của ma trận H_1 trong mục (a).

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Vì λ là thực, ma trận Hamiltonian nhiễu loạn có dạng

$$H_1 = \begin{pmatrix} a & d & e \\ d^* & b & f \\ e^* & f^* & c \end{pmatrix}.$$

trong đó a, b, c là các số thực.

(b) Ở gần đúng bậc nhất, giá trị riêng năng lượng sẽ là giá trị trung bình của Hamiltonian ở các trạng thái được lựa chọn. Như vậy

$$\begin{aligned} E_+ &= \langle +|H_0 + \lambda H_1|+\rangle \\ &= \langle +|H_0|+\rangle + \lambda\langle +|H_1|+\rangle \\ &= \Delta + \lambda + \frac{\lambda^2}{\Delta} + O(\lambda^3). \end{aligned}$$

So sánh hệ số của λ, ta được

$$\langle +|H_1|+\rangle = 1.$$

tương tự

$$\langle -|H_1|-\rangle = -1.$$

Vì các mức năng lượng tương ứng với $|2\rangle$ và $|3\rangle$ là suy biến, ta sẽ thực hiện phép biến đổi sang các trạng thái khác để biểu diễn không còn là suy biến nữa,

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle \pm |3\rangle).$$

Khi đó H_1 sẽ biến đổi thành một biểu diễn mới trong hệ vectơ cơ sở

$|1\rangle, |+\rangle, |-\rangle$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & d & e \\ d^* & b & f \\ e^* & f^* & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a & \frac{d+e}{\sqrt{2}} & \frac{d-e}{\sqrt{2}} \\ \frac{d^*+e^*}{\sqrt{2}} & 1 & 0 \\ \frac{d^*-e^*}{\sqrt{2}} & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Trong biểu diễn này ta đã dùng

$$\langle +|H_1|+\rangle = \frac{1}{2}(b+f+f^*+c) = 1\,,$$
$$\langle -|H_1|-\rangle = \frac{1}{2}(b-f-f^*+c) = -1$$

và chọn nghiệm

$$b = c = 0, \qquad f = f^* = 1\,.$$

Lý thuyết nhiễu loạn không suy biến sẽ cho

$$E_m = E_m^{(0)} + \lambda H'_{mm} + \lambda^2 \sum_{n\neq m}{}' \frac{|H'_{mn}|^2}{E_m - E_n} + O(\lambda^3)\,.$$

Như vậy

$$E_1 = 0 + \lambda a + \frac{\lambda^2|d+e|^2}{2(0-\Delta)} + \frac{\lambda^2|d-e|^2}{2(0-\Delta)} + O(\lambda^3)$$
$$= \lambda a - \lambda^2\left(\frac{|d+e|^2}{2\Delta} + \frac{|d-e|^2}{2\Delta}\right) + O(\lambda^3)\,,$$

$$E_2 = \Delta + \lambda + \frac{\lambda^2|d+e|^2}{2\Delta} + O(\lambda^3)\,,$$

$$E_3 = \Delta - \lambda + \frac{\lambda^2|d-e|^2}{2\Delta} + O(\lambda^3)\,.$$

Đồng nhất E_1, E_2, E_3 với những năng lượng đã cho E_1, E_+, E_- và so sánh hệ số của λ và λ^2 ta được $a = 0$ và

$$|d+e|^2 + |d-e|^2 = 2,$$
$$|d+e|^2 = 2,$$
$$|d-e|^2 = 0,$$

hoặc $d + e = \sqrt{2}e^{i\delta}, d - e = 0$, trong đó δ là một hằng số tùy ý.

Do đó $a = 0,\ d = e = \frac{e^{i\delta}}{\sqrt{2}}$ và

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta} & \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\delta} & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\delta} & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

là biểu diễn hệ cơ sở là vectơ trạng thái $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$.

5046

Hai fermion đồng nhất spin $\frac{1}{2}$ được giam trong một thế dao động tử điều hòa đẳng hướng ba chiều với tần số cổ điển ω. Thêm vào đó còn có một tương tác tầm ngắn độc lập với spin giữa các fermion.

(a) Hãy lập một hệ thống kí hiệu quang phổ cho các trạng thái năng lượng riêng cho đến năng lượng $5\hbar\omega$ (đo từ đáy của hố thế).

(b) Hãy viết hàm sóng gần đúng thích hợp (nghĩa là, đến bậc thấp nhất của tương tác) của hệ, biểu diễn qua hàm sóng một hạt của dao động tử điều hòa, cho tất cả các trạng thái đến năng lượng $4\hbar\omega$.

(c) Cho một tương tác đặc trưng giữa các hạt $V_{12} = -\lambda\delta^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, hãy tìm năng lượng của các trạng thái nói ở câu (b), đúng đến bậc nhất theo λ. Bạn có thể để kết quả dưới dạng tích phân.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Cho một dao động tử điều hòa ba chiều,

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 2n_r + l,$$

trong đó n_r và l là các số nguyên không âm. Cho một hệ gồm hai hạt fermion đồng nhất trong hố thế dao động tử điều hòa, từ Hamiltonian, ta có,

$$E_N = \left(n_1 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_2 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega = (N+3)\hbar\omega, \quad N = n_1 + n_2 .$$

Kết quả là, với

$$E_0 = 3\hbar\omega, (l_1, l_2) = (0,0)\,,$$

ta chỉ có một trạng thái $^1S_0$; với

$$E_1 = 4\hbar\omega,\ (l_1, l_2) = (0,0) \text{ hoặc } (0,1),\ (s_1, s_2) = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right),$$

và sẽ có hai trạng thái $^1P_1$ và $^3P_{210}$; với

$E_2 = 5\hbar\omega$, và

(1) $(n_1, n_2) = (2,0)$ hoặc $(0,2)$,

$$\begin{cases} (l_1, l_2) = (0,0), & \text{có hai trạng thái } ^1S_0,\ ^3S_1\,; \\ (l_1, l_2) = (2,0) \text{ hoặc } (0,2), & \text{có hai trạng thái } ^1D_2,\ ^3D_{321}\,; \end{cases}$$

(2) $(n_1, n_2) = (1,1)$, $(l_1, l_2) = (1,1)$, có ba trạng thái $^1S_0$, $^1D_2$, $^3P_{210}$.

(b) Gọi ψ_0 là trạng thái cơ bản và ψ_{1m} là trạng thái kích thích đầu tiên của hệ đơn hạt, trong đó $m = 0, \pm1$, và χ_0 và χ_{1m} là các trạng thái spin đơn tuyến và tam tuyến. Với cách đánh số trạng thái $|NLL_zSS_z\rangle$, hàm sóng được yêu cầu là

$$|00000\rangle = \chi_0\psi_0(1)\psi_0(2), \quad \text{trạng thái } ^1S_0\,;$$

$$|11m00\rangle = \chi_0\frac{1}{\sqrt{2}}(1+\hat{P}_{12})\,\psi_0(1)\psi_{1m}(2), \quad \text{trạng thái } ^1P_1\,;$$

$$|11m1M\rangle = \chi_{1M}\frac{1}{\sqrt{2}}(1-\hat{P}_{12})\,\psi_0(1)\psi_{1m}(2), \quad \text{trạng thái } ^3P_{210}\,;$$

trong đó $m, M = 0, \pm1$ ($L_z = m$, $S_z = M$).

(c) Cho trạng thái cơ bản $^1S_0$, bổ chính năng lượng đến bậc nhất theo λ là

$$\langle ^1S_0|V_{12}|^1S_0\rangle \approx -\lambda\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\left[\psi_0(\mathbf{r}_1)\,\psi_0(\mathbf{r}_2)\right]^2$$

$$= -\lambda\int d\mathbf{r}\psi_0^4(\mathbf{r}) = -\lambda\left(\frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}\right)^3$$

với $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$. Do đó, năng lượng trạng thái cơ bản là

$$E(|^1S_0\rangle) = 3\hbar\omega - \lambda\left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} .$$

Trạng thái kích thích đầu tiên được lập từ 12 trạng thái suy biến (nhưng vì không có spin trong V_{12} cho nên $\langle^1P_1|V_{12}|^3P_1\rangle = 0$).

Vì hàm sóng không gian là phản đối xứng khi $S = 1$, giá trị trung bình của $-\lambda\delta^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ sẽ bằng không, nghĩa là, $\langle 11m'1M'|V_{12}|11m1M\rangle = \delta_{M'M}\langle 1m'|V_{12}|1m\rangle = 0$. Bởi vì

$$E(|^3P_{210}\rangle) = 4\hbar\omega ,$$

$$\begin{aligned}\langle 11m'00|V_{12}|11m00\rangle &= -\lambda\int\frac{4}{2}d\mathbf{r}\psi_0^2(\mathbf{r})\psi_{1m'}^*(\mathbf{r})\psi_{1m}(\mathbf{r})\\ &= -2\lambda\int d\mathbf{r}|\psi_0(\mathbf{r})\psi_{1m}(\mathbf{r})|^2\delta_{m'm}\\ &= -\lambda\left(\frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}\right)^3\delta_{m'm} ,\end{aligned}$$

ta có

$$E(|^1P_{1m}\rangle) = 4\hbar\omega - \lambda\left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} ,$$

trong đó m là giá trị riêng của L_z.

5047

Hamiltonian của một dao động tử điều hòa hai chiều là

$$H = \omega(n_1 + n_2 + 1) ,$$

trong đó $n_i = a_i^+a_i$, với $[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}$ và $[a_i, a_j] = 0$.

(a) Hãy tìm các hệ thức giao hoán của tập hợp các toán tử $\{H, J_1, J_2, J_3\}$ trong đó

$$J_1 = \frac{1}{2}(a_2^+a_1 + a_1^+a_2), \quad J_2 = \frac{i}{2}(a_2^+a_1 - a_1^+a_2) ,$$

$$J_3 = \frac{1}{2}(a_1^+a_1 - a_2^+a_2) .$$

(b) Chứng tỏ rằng $\mathbf{J}^2 \equiv J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$ và J_3 tạo thành một hệ đầy đủ các toán tử giao hoán nhau và hãy tìm các vectơ riêng chuẩn hóa và các giá trị riêng của chúng.

(c) Hãy thảo luận về tính suy biến của phổ và sự tách mức dưới tác dụng của nhiễu loạn $\mathbf{V} \cdot \mathbf{J}$ trong đó $\mathbf{V}$ là một vectơ hằng ba chiều.

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Hệ được coi như một hệ các boson, có hai trạng thái đơn hạt. Toán tử a_i^+ và a_i tương ứng là toán tử sinh hủy. Trong số các giao hoán tử chỉ có $[a_i, a_i^+]$ là khác không, ta có thể sử dụng hệ thức

$$[ab, cd] = a[b, c]d + ac[b, d] + [a, c]bd + c[a, d]b$$

để thu được

$$[a_1^+ a_1, a_1^+ a_1] = [a_2^+ a_2, a_2^+ a_2] = [a_1^+ a_1, a_2^+ a_2] = 0\,,$$
$$[a_1^+ a_1, a_2^+ a_1] = -[a_2^+ a_2, a_2^+ a_1] = -a_2^+ a_1\,,$$
$$[a_1^+ a_1, a_1^+ a_2] = -[a_2^+ a_2, a_1^+ a_2] = a_1^+ a_2\,,$$
$$[a_2^+ a_1, a_1^+ a_2] = a_2^+ a_2 - a_1^+ a_1\,.$$

Do đó

$$[H, J_1] = [H, J_2] = [H, J_3] = 0\,,$$
$$[J_1, J_2] = iJ_3,\ [J_2, J_3] = iJ_1,\ [J_3, J_1] = iJ_2\,.$$

(b) Các hệ thức giao hoán trên đây chứng tỏ rằng J_1, J_2, J_3 có cùng tính chất như các thành phần của mômen xung lượng $\mathbf{L}$. Do đó, $\hat{\mathbf{J}}^2$ và J_3 giao hoán nhau và tạo thành hệ đầy đủ các biến động lực của hệ hai chiều.

Các hệ thức giao hoán của a, a^+,

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = 0\,,$$

có thể thỏa mãn nếu định nghĩa

$$a_1|n_1, n_2\rangle = \sqrt{n_1}|n_1 - 1, n_2\rangle, \quad a_2|n_1, n_2\rangle = \sqrt{n_2}|n_1, n_2 - 1\rangle$$
$$a_1^+|n_1, n_2\rangle = \sqrt{n_1 + 1}|n_1 + 1, n_2\rangle, \quad a_2^+|n_1, n_2\rangle = \sqrt{n_2 + 1}|n_1, n_2 + 1\rangle$$

và như vậy

$$|n_1, n_2\rangle = (n_1!n_2!)^{-\frac{1}{2}} (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} |0,0\rangle \,.$$

Các vectơ đó có thể lấy làm vectơ riêng chung trực chuẩn của hệ đầy đủ các biến động lực $\hat{\mathbf{J}}^2$ và J_3. Vì

$$\begin{aligned}
J^2 &= \frac{1}{4}\{(a_2^+ a_1 + a_1^+ a_2)^2 - (a_2^+ a_1 - a_1^+ a_2)^2 + (a_1^+ a_1 - a_2^+ a_2)^2\} \\
&= \frac{1}{4}\{2a_2^+ a_1 a_1^+ a_2 + 2a_1^+ a_2 a_2^+ a_1 + a_1^+ a_1 a_1^+ a_1 \\
&\quad + a_2^+ a_2 a_2^+ a_2 - a_1^+ a_1 a_2^+ a_2 - a_2^+ a_2 a_1^+ a_1\} \\
&= \frac{1}{4}\{a_2^+ a_1 a_1^+ a_2 + a_1^+ a_2 a_2^+ a_1 + a_2^+ a_2 [a_1, a_1^+] \\
&\quad + a_1^+ a_1 [a_2, a_2^+] + a_1^+ a_1 a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2 a_2^+ a_2\} \\
&= \frac{1}{4}\{a_1^+ a_2 a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1 a_2^+ a_1 + a_2^+ a_2 + a_1^+ a_1 + a_1^+ a_1 a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2 a_2^+ a_2\} \,,
\end{aligned}$$

trong đó ta đã sử dụng

$$a_2^+ a_1 a_1^+ a_2 = a_2^+ a_1 a_2 a_1^+ = a_2^+ a_2 a_1 a_1^+ , \text{ etc.},$$

và

$$\begin{aligned}
a_1^+ a_2 |n_1, n_2\rangle &= \sqrt{(n_1 + 1) n_2} |n_1, n_2\rangle, \\
a_1^+ a_1 |n_1, n_2\rangle &= \sqrt{n_1} a_1^+ |n_1 - 1, n_2\rangle = n_1 |n_1, n_2\rangle, \text{ etc},
\end{aligned}$$

ta thu được

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{J}}^2 |n_1, n_2\rangle &= \frac{1}{4} [(n_1 + 1) n_2 + (n_2 + 1) n_1 + n_1^2 + n_2^2 + n_1 + n_2] |n_1, n_2\rangle \\
&= \frac{1}{2}(n_1 + n_2) \left[\frac{1}{2}(n_1 + n_2) + 1\right] |n_1, n_2\rangle
\end{aligned}$$

và

$$\begin{aligned}
\hat{J}_z |n_1, n_2\rangle &= \frac{1}{2}(a_1^+ a_1 - a_2^+ a_2) |n_1, n_2\rangle \\
&= \frac{1}{2}(n_1 - n_2) |n_1, n_2\rangle \,.
\end{aligned}$$

Như vậy, các giá trị riêng của $\hat{\mathbf{J}}^2$, J_z tương ứng sẽ là

$$J^2 = \frac{1}{2}(n_1 + n_2)\left[\frac{1}{2}(n_1 + n_2) + 1\right]$$

$$J_z = \frac{1}{2}(n_1 - n_2).$$

Hơn nữa với

$$n_1 = j + m, \quad n_2 = j - m,$$

các giá trị riêng nói trên trở thành

$$\hat{\mathbf{J}}^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle,$$

$$J_z|j, m\rangle = m|j, m\rangle.$$

(c) Các mức năng lượng có cùng giá trị J là suy biến. Tình trạng hoàn toàn tương tự như trường hợp mômen xung lượng nói chung. Việc thêm vào nhiễu loạn $\mathbf{V} \cdot \mathbf{J}$ sẽ khử suy biến, bởi vì các mức năng lượng khác nhau sẽ có giá trị của JV khác nhau theo hướng của vectơ $\mathbf{V}$.

5048

Cho một dao động tử hai chiều

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}(x^2 + y^2).$$

(a) Tìm hàm sóng và năng lượng cho ba trạng thái thấp nhất?

(b) Tiếp theo, xét một nhiễu loạn thêm vào Hamiltonian

$$V = \frac{1}{2}\varepsilon xy(x^2 + y^2), \quad (\varepsilon \ll 1).$$

Hãy tính đến bậc nhất trong lý thuyết nhiễu loạn hiệu ứng của V lên năng lượng của các trạng thái đã tìm được ở câu (a).

(Wisconsin)

Lời giải:

Hamiltonian được cho trong hệ đơn vị $\hbar = m = \omega = 1$.

(a) Hàm sóng và năng lượng của dao động tử điều hòa hai chiều tương ứng là

$$\psi_{n_1n_2} = N_{n_1n_2}\, e^{-(x^2+y^2)/2} H_{n_1}(x) H_{n_2}(y)\,,$$
$$E_{n_1n_2} = n_1 + n_2 + 1 = N + 1\,,$$

trong đó H_i là đa thức Hermite. Hàm sóng của ba trạng thái thấp nhất là

$$\psi_{00}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)\right\}, \quad E_{00} = 1\,,$$
$$\psi_{10}(x,y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, x \exp\left\{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)\right\}, \quad E_{10} = 2\,,$$
$$\psi_{01}(x,y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, y \exp\left\{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)\right\}, \quad E_{01} = 2\,,$$

vì $H_0 = 1$, $H_1(\xi) = 2\xi$.

(b) Bổ chính bậc nhất cho năng lượng của trạng thái cơ bản là

$$V_{00} = \langle\psi_{00}|V|\psi_{00}\rangle = 0\,,$$

vì đó là tích phân theo x hoặc theo y đều là các hàm lẻ

Khi $N = 1$, có suy biến bội 2, và

$$V_{11} = V_{22} = 0\,,$$
$$V_{12} = V_{21} = \frac{\varepsilon}{2} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{\pi}\, xy e^{-(x^2+y^2)}\, xy(x^2+y^2)\, dxdy$$
$$= \frac{\varepsilon}{\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2+y^2)}\, (x^2+y^2) x^2 y^2 dxdy == \frac{3\varepsilon}{4}\,.$$

phương trình trường kì đối với ma trận Hamiltonian nhiễu loạn là

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0\,,$$

suy ra năng lượng được bổ chính là

$$E'_{10} = E_{10} \pm V_{12} = 2 \pm \frac{3}{4}\varepsilon\,.$$

5049

Một hạt khối lượng m chuyển động (phi tương đối tính) trong thế ba chiều

$$V = \frac{1}{2}k(x^2 + y^2 + z^2 + \lambda xy)\,.$$

(a) Coi λ như một tham số nhỏ, hãy tính năng lượng của trạng thái cơ bản đến bậc hai của lý thuyết nhiễu loạn.

(b) Coi λ như một tham số nhỏ, hãy tính các mức năng lượng của trạng thái kích thích đầu tiên đến bậc nhất trong lý thuyết nhiễu loạn.

Các công thức từ lời giải của dao động tử điều hòa một chiều là

$$\omega = (k/m)^{\frac{1}{2}},\ E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\ n = 0, 1, 2, \dots\,,$$

$$x = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}(a + a^+), \quad a\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}\,,$$

$$[a, a^+] = 1, \quad a^+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}\,.$$

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Trạng thái cơ bản có hàm sóng

$$\psi_{000}(x, y, z) = \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)$$

và năng lượng là $\frac{3}{2}\hbar\omega$. Coi $\frac{1}{2}\lambda xy$ như là một nhiễu loạn, bổ chính bậc nhất cho năng lượng sẽ là

$$E^{(1)} = \langle 000|\frac{k\lambda}{2}xy|000\rangle = 0\,,$$

vì tích phân là một hàm lẻ đối với x hoặc y. Năng lượng bổ chính bậc hai là

$$E^{(2)} = \sum_{n_1, n_2} |\langle 000|\,\frac{k\lambda}{2}\,xy|n_1 n_2 n_3\rangle|^2/(-n_1 - n_2)\hbar\omega$$

$$= -\frac{\lambda^2}{32}\hbar\omega\,,$$

vì

$$\langle 0, 0, 0|\,\frac{k\lambda}{2}\,xy|n_1 n_2 n_3\rangle = \frac{\lambda}{4}\hbar\omega\delta_{1n_1}\delta_{1n_2}\delta_{0n_3}\,.$$

Như vậy, năng lượng của trạng thái cơ bản được bổ chính đến bậc hai sẽ là

$$E_0^{(1)} = \hbar\omega\left(\frac{3}{2} - \frac{\lambda^2}{32}\right).$$

(b) Mức năng lượng kích thích đầu tiên là $E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ và là suy biến bội ba với ba hàm sóng là

$$|1,0,0\rangle,\ |0,1,0\rangle,\ |0,0,1\rangle .$$

Ma trận của nhiễu loạn $\frac{\lambda k}{2}xy$ là

$$\frac{\lambda\hbar\omega}{4}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix},$$

và phương trình trường kì

$$\begin{vmatrix} E_1^{(1)} & \frac{\lambda\hbar\omega}{4} & 0\\ \frac{\lambda\hbar\omega}{4} & E_1^{(1)} & 0\\ 0 & 0 & E_1^{(1)}\end{vmatrix} = 0$$

có nghiệm là

$$E_1^{(1)} = 0,\ \frac{\lambda\hbar\omega}{4},\ -\frac{\lambda\hbar\omega}{4}.$$

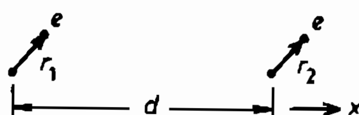
Như vậy, mức năng lượng kích thích đầu tiên tách thành ba mức

$$\left(\frac{5}{2}+\frac{\lambda}{4}\right)\hbar\omega,\ \frac{5}{2}\hbar\omega,\ \left(\frac{5}{2}-\frac{\lambda}{4}\right)\hbar\omega.$$

5050

Xét mô hình sau đây đối với lực Van der Waals giữa hai nguyên tử. Mỗi nguyên tử gồm một electron liên kết với một hạt nhân rất nặng bởi thế $V(r_i) = \frac{1}{2}m\omega^2 r_i^2$. Giả sử rằng, hai hạt nhân cách nhau một khoảng $d \gg \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ và nằm dọc theo trục x, như trên Hình 5.17, và giữa hai nguyên tử có một tương tác $V_{12} = \beta\frac{x_1x_2e^2}{d^3}$. Bỏ qua việc chúng là các hạt không phân biệt được.

(a) Xét trạng thái cơ bản của toàn hệ khi $\beta = 0$. Hãy tính năng lượng và hàm sóng của nó theo $\mathbf{r}_1$ và $\mathbf{r}_2$.



Hình 5.17

(b) Hãy tính bổ chính khác không thấp nhất cho năng lượng và cho hàm sóng gây bởi V_{12}.

(c) Hãy tính giá trị căn quân phương trung bình của khoảng cách giữa hai electron trong gần đúng bậc thấp nhất theo β. Cho:

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\frac{x^2 m\omega}{2\hbar}} ;$$

$$\psi_1(x) = \langle x|1\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x e^{-\frac{x^2 m\omega}{2\hbar}} ,$$

$$\langle n|x|m\rangle = 0, \text{ với } |n-m| \neq 1 ,$$

$$\langle n-1|x|n\rangle = (n\hbar/2m\omega)^{1/2} ,$$

$$\langle n+1|x|n\rangle = ((n+1)\hbar/2m\omega)^{1/2} ,$$

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Phương trình Schrödingercủa hệ là

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(r_1^2 + r_2^2) + \beta\frac{x_1 x_2 e^2}{d^3}\right\}\psi = E\psi.$$

Khi $\beta = 0$ hệ giống như hai dao động tử điều hòa độc lập ba chiều và năng lượng cùng hàm sóng của trạng thái cơ bản là

$$E_0^{(0)} = \frac{3}{2}\hbar\omega + \frac{3}{2}\hbar\omega = 3\hbar\omega ,$$

$$\Psi_0^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_0(x_1)\psi_0(y_1)\psi_0(z_1)\psi_0(x_2)\psi_0(y_2)\psi_0(z_2)$$

$$= \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right)^3 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(r_1^2 + r_2^2)} ,$$

trong đó $r_1^2 = x_1^2 + y_1^2 + z_1^2$, v.v.

(b) Coi

$$H' = \frac{\beta e^2}{d^3} x_1 x_2$$

như là một nhiễu loạn, ta có bổ chính bậc nhất cho năng lượng

$$\begin{aligned}\Delta E_0^{(1)} &= \frac{\beta e^2}{d^3} \langle 00|x_1 x_2|00\rangle \\ &= \frac{\beta e^2}{d^3} \langle \psi_0(x_1)|x_1|\psi_0(x_1)\rangle \langle \psi_0(x_2)|x_2|\psi_0(x_2)\rangle = 0\end{aligned}$$

đối với $\langle n|x|k\rangle = 0$ đối với $k \neq n \pm 1$.

Đối với bổ chính bậc hai cho năng lượng, ta có

$$\begin{aligned}\langle 00|H'|n_1 n_2\rangle &= \frac{\beta e^2}{d^3} \langle 0|x_1|n_1\rangle \langle 0|x_2|n_2\rangle \\ &= \frac{\beta e^2}{d^3} \frac{\hbar}{2m\omega} \delta_{n_1,1}\delta_{n_2,1} ,\end{aligned}$$

và do đó

$$\begin{aligned}\Delta E_0^{(2)} &= \sum_{n_1,n_2\neq 0}' \frac{|\langle 00|H'|n_1 n_2\rangle|^2}{E_0 - E_{n_1 n_2}} \\ &= \frac{|\langle 00|H'|11\rangle|^2}{E_0 - E_{11}} = -\frac{1}{2\hbar\omega} \left(\frac{\beta e^2}{d^3} \frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 ,\end{aligned}$$

vì $E_{n_1 n_2} = (n_1 + \frac{3}{2})\hbar\omega + (n_2 + \frac{3}{2})\hbar\omega$. Như vậy, năng lượng đã được bổ chính đến bậc thấp nhất là

$$E_0 = 3\hbar\omega - \frac{1}{8}\left(\frac{e^2}{d^3}\right)^2 \frac{\hbar}{m^2\omega^3}\beta^2 ,$$

và hàm sóng đã bổ chính là

$$\begin{aligned}\Psi_0 &= \Psi_0^{(0)} + \frac{\langle 00|H'|11\rangle}{E_0 - E_{11}} \Psi_1^{(0)} \\ &= \Psi_0^{(0)} - \frac{\beta e^2}{4d^3} \frac{1}{m\omega^2} \Psi_1^{(0)} ,\end{aligned}$$

trong đó $\Psi_1^{(0)} = \psi_1(x_1)\psi_0(y_1)\psi_0(z_1)\psi_1(x_2)\psi_0(y_2)\psi_0(z_2)$.

(c) Gọi $S_{12} = x_2 - x_1$. Khi đó $S_{12}\rangle = \langle x_2\rangle - \langle x_1\rangle = 0$ vì Ψ_0 không đổi khi hoán vị 1 và 2, và do đó $\langle x_1\rangle = \langle x_2\rangle$. Xét

$$\langle S_{12}^2\rangle = \langle x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2\rangle = 2\langle x_1^2\rangle - 2\langle x_1x_2\rangle\,.$$

ta có

$$\begin{aligned}\langle x_1x_2\rangle &= \langle \Psi_0^{(0)} - \lambda\Psi_1^{(0)}|x_1x_2|\Psi_0^{(0)} - \lambda\Psi_1^{(0)}\rangle \\ &= -\lambda\{\langle\Psi_0^{(0)}|x_1x_2|\Psi_1^{(0)}\rangle + \text{biểu thức liên hợp}\} \\ &= -2\lambda(\langle 0|x|1\rangle)^2 = -\lambda\frac{\hbar}{m\omega}\,,\end{aligned}$$

trong đó

$$\lambda = \frac{\beta e^2}{4d^3}\frac{1}{m\omega^2}\,,$$

và

$$\begin{aligned}\langle x_1^2\rangle &= \langle\Psi_0^{(0)} - \lambda\Psi_1^{(0)}|x_1^2|\Psi_0^{(0)} - \lambda\Psi_1^{(0)}\rangle \\ &= \langle 0|x^2|0\rangle + \lambda^2\langle 1|x^2|1\rangle \\ &= \langle 0|x^2|0\rangle + O(\lambda^2)\,.\end{aligned}$$

Đồng thời, theo định lý virial

$$\frac{1}{2}m\omega^2\langle 0|x^2|0\rangle = \frac{1}{4}\hbar\omega\,,$$

hay

$$2\langle x_1^2\rangle = \frac{\hbar}{m\omega} + O(\lambda^2)\,.$$

Do đó

$$\begin{aligned}\langle S_{12}^2\rangle &= 2\langle x_1^2\rangle - 2\langle x_1x_2\rangle \\ &= \frac{\hbar}{m\omega} + \frac{2\hbar}{m\omega}\lambda + O(\lambda^2) \approx \frac{\hbar}{m\omega}(1 + 2\lambda)\,.\end{aligned}$$

Như vậy, căn quân phương của khoảng cách giữa hai electron theo trục x sẽ là

$$\begin{aligned}\sqrt{\langle(d + S_{12})^2\rangle} &= \sqrt{d^2 + 2d\langle S_{12}\rangle + \langle S_{12}^2\rangle} \\ &\approx \sqrt{d^2 + \frac{\hbar}{m\omega}(1 + 2\lambda)} = d\sqrt{1 + \frac{\hbar}{m\omega d^2}\left(1 + \frac{\beta e^2}{2m\omega^2 d^3}\right)}\,.\end{aligned}$$

5051

Trạng thái kích thích đầu tiên của dao động tử điều hòa ba chiều đẳng hướng (với tần số góc tự nhiên ω_0 và khối lượng m) là suy biến bội ba này. Hãy dùng phương pháp nhiễu loạn để tính sự tách mức (đến gần đúng bậc nhất) của trạng thái suy biến bội ba này gây bởi nhiễu loạn nhỏ dưới dạng $H' = bxy$, trong đó b là một hằng số. Hãy biểu diễn hàm sóng đến gần đúng bậc nhất cho ba mức được tách theo hàm sóng của dao động tử điều hòa ba chiều chưa nhiễu loạn, biết rằng, đối với một dao động tử điều hòa một chiều,

$$\langle n|x|n+1\rangle = \sqrt{\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega_0}}\,.$$

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Viết trạng thái năng lượng chưa nhiễu loạn như sau

$$|n_x n_y n_z\rangle = |n_x\rangle|n_y\rangle|n_z\rangle\,,$$

trong đó $|n\rangle$ là trạng thái riêng thứ n của một dao động tử điều hòa một chiều. Trạng thái kích thích đầu tiên của dao động tử điều hòa ba chiều đẳng hướng là suy biến trong các trạng thái

$$|\psi_1\rangle = |100\rangle,\ |\psi_2\rangle = |010\rangle,\ |\psi_3\rangle = |001\rangle\,.$$

Tính các yếu tố ma trận

$$H'_{ij} = b\langle\psi_i|xy|\psi_j\rangle\,,$$

ta tìm được

$$H'_{11} = b\langle 100|xy|100\rangle = b\langle 1|x|1\rangle\,\langle 0|y|0\rangle = 0 = H'_{22} = H'_{33}\,,$$

$$H'_{12} = b\langle 100|xy|010\rangle = b\langle 1|x|0\rangle\,\langle 0|y|1\rangle = b\langle 0|x|1\rangle^*\langle 0|y|1\rangle = \frac{\hbar b}{2m\omega_o} = H'_{21},$$

$$H'_{13} = b\langle 100|xy|001\rangle = b\langle 1|x|0\rangle\,\langle 0|y|0\rangle = 0 = H'_{31}\,,$$

$$H'_{23} = b\langle 010|xy|001\rangle = b\langle 0|x|0\rangle\,\langle 1|y|0\rangle = 0 = H'_{32}\,.$$

Như vậy

$$H' = \frac{\hbar b}{2m\omega_0}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Phương trình trường kì

$$\det |H' - E^{(1)}| = 0$$

có nghiệm $E^{(1)} = 0$, $E^{(1)} = \pm\frac{\hbar b}{2m\omega_0}$. Dao động tử không nhiễu loạn có năng lượng $E_n^{(0)} = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega$. Trạng thái kích thích đầu tiên, $n = 1$, bây giờ được tách thành ba mức với hàm sóng tương ứng kèm theo

$$E_0^{(1)} = \frac{5}{2}\hbar\omega + 0 = \frac{5}{2}\hbar\omega, \quad |\psi_0'\rangle = |\psi_3\rangle = |001\rangle .$$

$$E_\pm^{(1)} = \frac{5}{2}\hbar\omega \pm \frac{\hbar b}{2m\omega_0}, \quad |\psi_\pm^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|100\rangle \pm |010\rangle) .$$

5052

Một hệ cơ học lượng tử được mô tả bởi Hamiltonian $H = H_0 + H'$, trong đó $H' = i\lambda[A, H_0]$ là một nhiễu loạn đối với Hamiltonian không nhiễu loạn H_0, A là toán tử Hecmite và λ là một số thực. Gọi B là toán tử Hecmite thứ hai và đặt $C = i[B, A]$.

(a) Cho giá trị kì vọng của các toán tử A, B và C trong trạng thái cơ bản không nhiễu loạn (và không suy biến); gọi chúng là $\langle A\rangle_0$, $\langle B\rangle_0$ và $\langle C\rangle_0$. Khi có nhiễu loạn, hãy tính giá trị kì vọng của B trong trạng thái cơ bản nhiễu loạn đến bậc nhất theo λ.

(b) Hãy kiểm tra kết quả cho bài toán ba chiều sau đây

$$H_0 = \sum_{i=1}^{3}\left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2\right), \quad H' = \lambda x_3 ,$$

bằng cách tính giá trị kì vọng trong trạng thái cơ bản của $\langle x_i\rangle$, $(i = 1, 2, 3)$ đến bậc thấp nhất theo λ. So sánh kết quả đó với kết quả tính toán chính xác đối với $\langle x_i\rangle$.

(*Princeton*)

Lời giải:

(a) Giả sử rằng, trạng thái riêng và các năng lượng tương ứng của một hệ không nhiễu loạn là

$$|k\rangle^{(0)}, E_k^{(0)} ,$$

khi đó

$$\hat{H}_0|k\rangle^{(0)} = E_k^{(0)}|k\rangle^{(0)} .$$

Các yếu tố ma trận của Hamiltonian nhiễu loạn là

$$H'_{n0} = {}^{(0)}\langle n|\hat{H}'|0\rangle^{(0)} = {}^{(0)}\langle n|i\lambda A H_0 - i\lambda H_0 A|0\rangle^{(0)}$$
$$= i\lambda(E_0^{(0)} - E_n^{(0)})^{(0)}\langle n|A|0\rangle^{(0)} .$$

Khi đó, hàm sóng của trạng thái cơ bản với bổ chính bậc nhất là

$$|0\rangle = |0\rangle^{(0)} + \sum_{n\neq 0}^{\infty} \frac{H'_{n0}}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}} |n\rangle^{(0)}$$
$$= |0\rangle^{(0)} + \sum_{n\neq 0}^{\infty} i\lambda^{(0)}\langle n|A|0\rangle^{(0)}|n\rangle^{(0)}$$
$$= (1 - i\lambda\langle A\rangle_0)|0\rangle^{(0)} + \sum_{n=0}^{\infty} i\lambda^{(0)}\langle n|A|0\rangle^{(0)}|n\rangle^{(0)} .$$

Do đó

$$\langle 0|B|0\rangle = \Bigg[{}^{(0)}\langle 0|(1 + i\lambda\langle A\rangle_0) + (-i\lambda)$$
$$\times \sum_{n=0}^{\infty} ({}^{(0)}\langle n|A|0\rangle)^{*(0)}\langle n|\Bigg] B \Bigg[(1 - i\lambda\langle A\rangle_0)|0\rangle^{(0)}$$
$$+ i\lambda \sum_{m=0}^{\infty} {}^{(0)}\langle m|A|0\rangle^{(0)}|m\rangle^{(0)}\Bigg]$$
$$\approx \langle B\rangle_0 - \lambda^{(0)}\langle 0|iAB - iBA|0\rangle^{(0)}$$
$$= \langle B\rangle_0 + \lambda^{(0)}\langle 0|C|0\rangle^{(0)} = \langle B\rangle_0 + \lambda\langle C\rangle_0 ,$$

(đến bậc nhất theo λ).

Chú ý, tính đầy đủ của hệ các hàm sóng $|k\rangle^{(0)}$,

$$\sum_k |k\rangle^{(0)}\langle k|^{(0)} = 1 ,$$

đã được sử dụng trong các tính toán ở trên.

(b) Hamiltonian đã cho

$$H_0 = \sum_{i=1}^{3} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x_i^2\right) , \quad H' = \lambda x_3$$

thỏa mãn $H' = i\lambda[A, H_0] = \lambda x_3$ nếu đặt $A = \frac{p_3}{m\omega^2\hbar}$. Sử dụng kết quả ở câu (a) ta được những kết quả sau đây: Với $B = x_1$, vì

$$C_1 = i[B, A] = \frac{i}{m\omega^2\hbar}[x_1, p_3] = 0\,,$$

ta có

$$\langle x_1\rangle = \langle B\rangle \approx \langle B\rangle_0 + \lambda\langle C_1\rangle_0 = \langle x_1\rangle_0 + \lambda\langle C_1\rangle_0 = 0\,.$$

Chú ý rằng $\langle x_1\rangle = 0$ vì tích phân là một hàm lẻ của x_i. Cho $B = x_2$, các tính toán tương tự sẽ cho $\langle x_2\rangle = 0$. Với $B = x_3$, vì

$$C_3 = i[B. A] = i\left[x_3, \frac{p_3}{m\omega^2\hbar}\right] = -\frac{1}{m\omega^2}\,,$$

và như vậy

$$\langle C_3\rangle_0 = -\frac{1}{m\omega^2}\,,$$

ta có

$$\begin{aligned}\langle x_3\rangle = \langle B\rangle &\approx \langle x_3\rangle_0 + \lambda\langle C_3\rangle_0\\ &= -\frac{\lambda}{m\omega^2}\,.\end{aligned}$$

Để tìm nghiệm chính xác cho $\hat{H} = \hat{H}_0 + H'$, ta viết

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{i=1}^{3}\left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2\right) + \lambda x_3\\ &= \hat{H}_{01}(x_1) + \hat{H}_{02}(x_2) + \hat{H}_{03}\left(x_3 + \frac{\lambda}{m\omega^2}\right) - \frac{\lambda^2}{2m\omega^2}\,,\end{aligned}$$

trong đó $\hat{H}_{0i}(x_i) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_i^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2$ là Hamiltonian của một dao động tử điều hòa một chiều. Vì số hạng hằng số $-\lambda^2/2m\omega^2$ không ảnh hưởng đến động lực của hệ, hàm sóng chính xác của trạng thái cơ bản chính là hàm sóng của dao động tử điều hòa đẳng hướng

$$\begin{aligned}|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} &\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x_1^2\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x_2^2\right)\\ &\times\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x_3 + \frac{\lambda}{m\omega^2}\right)^2\right].\end{aligned}$$

Từ đó suy ra

$$\langle x_1 \rangle = 0, \ \langle x_2 \rangle = 0, \ \langle x_3 \rangle = -\frac{\lambda}{m\omega^2}.$$

Các kết quả này đúng hệt như kết quả đã tìm được trong câu (a).

5053

Một hạt khối lượng m chuyển động trong thế của dao động tử điều hòa ba chiều $V(x, y, z) = \frac{1}{2} m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$. Một nhiễu loạn nhỏ có dạng $\Delta V = kxyz + \frac{k^2}{\hbar\omega} x^2y^2z^2$ được đặt vào hệ, trong đó k là một hằng số nhỏ. Chú ý là k xuất hiện trong cả hai số hạng.

(a) Hãy tính sự chuyển dịch của năng lượng trạng thái cơ bản đến bậc hai theo k.

(b) Sử dụng một lập luận không phụ thuộc vào lý thuyết nhiễu loạn, hãy tìm giá trị trung bình của x trong trạng thái cơ bản của hệ đó.

Chú ý: Có thể bạn muốn biết vài hàm sóng đầu tiên của dao động tử điều hòa một chiều:

trạng thái cơ bản

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right),$$

trạng thái kích thích đầu tiên

$$\psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right),$$

trạng thái kích thích thứ hai

$$\psi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right).$$

(Princeton)

Lời giải:

Trạng thái của hạt trong hố thế của dao động tử điều hòa ba chiều là

$$\Phi_0(x, y, z) = \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)$$
$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \exp\left[-\frac{m\omega^2}{2\hbar} (x^2 + y^2 + z^2)\right].$$

Bổ chính bậc nhất cho năng lượng là

$$\begin{aligned}\langle\Delta E\rangle_1 &= \int \Phi_0(x,y,z)\left(kxyz + \frac{k^2}{\hbar\omega}x^2y^2z^2\right)\Phi_0(x,y,z)\,d^3\mathbf{x}\\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/2}\frac{k^2}{\hbar\omega}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} x^2\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)dx\right]^3\\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3\frac{k^2}{\hbar\omega}.\end{aligned}$$

Trong khi nhiễu loạn $\Delta V' = kxyz$ không cho đóng góp vào bổ chính bậc nhất, nên ta phải tính đến nhiễu loạn bậc hai để tìm sự chuyển dịch chính xác đến k^2. Các yếu tố ma trận của Hamiltonian nhiễu loạn là

$$\begin{aligned}\langle n|\Delta V'|0\rangle &= \int \Phi_n(x,y,z)\,kxyz\,\Phi_0(x,y,z)d^3x\\ &= k\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{n_1}(x)x\psi_0(x)dx\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{n_2}(y)y\psi_0(y)dy\\ &\quad\times\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{n_3}(z)z\psi_0(z)dz\\ &= k\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2}\delta(n_1-1)\delta(n_2-1)\delta(n_3-1),\end{aligned}$$

trong đó $n = n_1 + n_2 + n_3$, và như vậy, bổ chính bậc hai cho năng lượng là

$$\begin{aligned}\langle\Delta E\rangle_2 &= \sum_{n\neq 0}\frac{|\langle n|\Delta V'|0\rangle|^2}{E_0 - E_n}\\ &= \frac{k^2\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3}{E_0 - E_3} = -\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3\frac{k^2}{3\hbar\omega}.\end{aligned}$$

Như vậy, chuyển dịch năng lượng của trạng thái cơ bản chính xác đến k^2 là

$$\Delta E = \langle\Delta E\rangle_1 + \langle\Delta E\rangle_2 = \frac{2}{3}\frac{k^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3.$$

(b) $V + \Delta V$ sẽ không thay đổi đối với phép phản chiếu $x \to -x, y \to -y$, nghĩa là,

$$H(x,y,z) = H(-x,-y,z).$$

Hơn thế nữa hàm sóng của trạng thái cơ bản là không suy biến, cho nên $\psi(-x,-y,z) = \psi(x,y,z)$ và hệ quả là,

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= (\psi, x\psi)\\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x',y',z')x'\psi(x',y',z')dx'dy'\\ &= -\int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,y,z)\cdot x\cdot\psi(x,y,z)dxdy = -\langle x\rangle\,,\end{aligned}$$

trong đó, ta đã thực hiện phép biến đổi $x' = -x, y' = -y, z' = z$. Do đó, $\langle x\rangle = 0$. Bằng cách tương tự, ta được $\langle y\rangle = 0, \langle z\rangle = 0$. Như vậy $\langle \mathbf{x}\rangle = 0$.

5054

Một hạt spin $\frac{1}{2}$ khối lượng m chuyển động trong thế dao động tử điều hòa cầu $V = \frac{1}{2}m\omega^2r^2$ và tương tác $\lambda\sigma\cdot\mathbf{r}$ (lực tương tác spin quỹ đạo được bỏ qua). Như vậy, Hamiltonian thực sự là

$$H = H_0 + H'\,,$$

trong đó

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2r^2, \quad H' = \lambda\sigma\cdot\mathbf{r}\,.$$

Hãy tính sự chuyển dịch của năng lượng trạng thái cơ bản đến bậc hai theo nhiễu loạn H'.

(*Princeton*)

Lời giải:

Trạng thái cơ bản không nhiễu loạn là suy biến bậc hai với spin lên và xuống theo trục z.

Sử dụng phương pháp nhiễu loạn cho các trạng thái suy biến, nếu suy biến không mất đi sau khi chéo hóa Hamiltonian nhiễu loạn, ta sẽ chéo hóa ma trận sau đây để tìm vị trí của năng lượng

$$\langle n|V|n'\rangle + \sum_m \frac{\langle n|V|m\rangle\langle m|V|n'\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \equiv \langle n|W|n'\rangle\,.$$

Gọi $|n_xn_yn_z\uparrow\rangle$ và $|n_xn_yn_z\downarrow\rangle$ là hai trạng thái lượng tử không nhiễu loạn, trong đó n_x, n_y và n_z là số lượng tử dao động theo các hướng x, y và z, $\uparrow$ $(\downarrow)$

diễn tả trạng thái spin lên (xuống). Vì

$$E^{(0)}_{n_x n_y n_z} = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega\,,$$

ma trận sẽ có các yếu tố

$$\begin{aligned}
\langle 000\uparrow|W|000\uparrow\rangle &= \frac{\lambda^2\langle 000\uparrow|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}|001\uparrow\rangle\langle 001\uparrow|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}|000\uparrow\rangle}{\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{5}{2}\hbar\omega} \\
&\quad + \frac{\lambda^2\langle 000\uparrow|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}|100\downarrow\rangle\langle 100\downarrow|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}|000\uparrow\rangle}{\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{5}{2}\hbar\omega} \\
&\quad + \frac{\lambda^2\langle 000\uparrow|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}|010\downarrow\rangle\langle 010\downarrow|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}|000\uparrow\rangle}{\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{5}{2}\hbar\omega} \\
&= \lambda^2\left[\frac{|\langle 000\uparrow|\sigma_z z|001\uparrow\rangle|^2}{-\hbar\omega} + \frac{|\langle 000\uparrow|\sigma_x x|100\downarrow\rangle|^2}{-\hbar\omega}\right. \\
&\quad \left. + \frac{|\langle 000\uparrow|\sigma_y y|010\downarrow\rangle|^2}{-\hbar\omega}\right] \\
&= -\frac{3\lambda^2}{2m\omega^2}\,, \\
\langle 000\downarrow|W|000\downarrow\rangle &= -\frac{3\lambda^2}{2m\omega^2}\,, \\
\langle 000\uparrow|W|000\downarrow\rangle &= 0\,.
\end{aligned}$$

Trong những tính toán trên đây ta đã dùng

$$\langle n_i|x_i|n_i+1\rangle = \sqrt{\frac{(n_i+1)\hbar}{2m\omega}}\,, \quad x_i = x, y, z\,,$$

ất cả những yếu tố khác đều bằng không. Có thể thấy rằng, suy biến bội hai vẫn còn tồn tại đối với giá trị riêng $\frac{-3\lambda^2}{2m\omega^2}$. Điều đó nghĩa là suy biến không mất đi ít nhất là đến gần đúng bậc hai. Trạng thái cơ bản, hãy còn suy biến, nó có năng lượng là $\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{3\lambda^2}{2m\omega^2}$.

5055

Xét một hạt không có spin, khối lượng m và điện tích e được giam trong

một hốc hình cầu bán kính R: thế năng bằng không khi $|\mathbf{x}| \leq R$ và bằng vô hạn khi $|\mathbf{x}| > R$.

(a) Tìm năng lượng trạng thái cơ bản của hệ.

(b) Giả sử rằng, có đặt thêm một từ trường đều, yếu với cường độ $|\mathbf{B}|$. Hãy tính độ chuyển dịch đối với năng lượng trạng thái cơ bản của hệ.

(c) Giả sử rằng, thay cho từ trường ta đặt một điện trường đều yếu có cường độ $|\mathbf{E}|$. Năng lượng của trạng thái cơ bản sẽ tăng hay giảm? Hãy viết, không cần thực hiện tính toán, một công thức cho sự chuyển dịch năng lượng trạng thái cơ bản gây ra bởi điện trường.

(d) Nếu thay vào đó, ta có một từ trường rất mạnh cường độ $|\mathbf{B}|$, hãy tính gần đúng năng lượng của trạng thái cơ bản sẽ thế nào?

(Princeton)

Lời giải:

Phần xuyên tâm của phương trình Schrödingercho hạt trong hố thế là

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0, \quad (r < R),$$

trong đó $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, điều kiện biên là $R(r)|_{r=R_0} = 0$. Đổi sang biến không thứ nguyên $\rho = kr$, phương trình trên có dạng sau

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] R = 0\,.$$

Phương trình này có nghiệm $j_l(\rho)$ hữu hạn khi $\rho \to 0$, $j_l(\rho)$ liên quan đến hàm Bessel bởi hệ thức

$$j_l(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho)\,.$$

Như vậy, hàm sóng xuyên tâm là

$$R_{kl}(r) = C_{kl} j_l(kr)\,,$$

trong đó C_{kl} là hằng số chuẩn hóa.

Điều kiện biến đòi hỏi

$$j_l(kR_0) = 0$$

và nó có nghiệm

$$kR_0 = \alpha_{nl}, \quad n = 1, 2, 3 \cdots .$$

Do đó, trạng thái liên kết của hạt có các mức năng lượng là

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2mR_0^2}\alpha_{nl}^2, \quad n = 1, 2, 3 \ldots .$$

Đối với trạng thái cơ bản, $l = 0$ và $j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho}$, vì vậy $\alpha_{10} = \pi$ và năng lượng của trạng thái cơ bản là

$$E_{10} = \hbar^2\pi^2/2mR_0^2 .$$

(b) Lấy phương của từ trường làm trục z. Khi đó, thế vectơ **A** có thành phần

$$A_x = -\frac{B}{2}y, \ A_y = \frac{B}{2}x, \ A_z = 0 ,$$

và Hamiltonian của hệ là

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m}\left[\left(p_x + \frac{eB}{2c}y\right)^2 + \left(p_y - \frac{eB}{2c}x\right)^2 + p_z^2\right] + V(r) \\ &= \frac{1}{2m}\left[\mathbf{p}^2 - \frac{eB}{c}(xp_y - yp_x) + \frac{e^2B^2}{4c^2}(x^2+y^2)\right] + V(r) \\ &= \frac{1}{2m}\left[\mathbf{p}^2 - \frac{eB}{c}l_z + \frac{e^2B^2}{4c^2}(x^2+y^2)\right] + V(r) .\end{aligned}$$

Vì từ trường là yếu ta có thể coi $-\frac{eB}{c}l_z + \frac{e^2B^2}{4c^2}(x^2+y^2)$ như một nhiễu loạn. Khi hệ ở trạng thái cơ bản $l = 0$, $l_z = 0$ chúng ta chỉ cần xét hiệu ứng của số hạng $\frac{e^2B^2}{8mc^2}(x^2+y^2)$. Hàm sóng của trạng thái cơ bản là

$$\begin{aligned}\psi(r,\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{2k^2}{R_0}}\, j_0(kr)\, Y_{(00)}(\theta,\varphi) \\ &= \sqrt{\frac{k^2}{2\pi R_0}}\, j_0(kr) = \frac{\sin(kr)}{\sqrt{2\pi R_0}\, r} ,\end{aligned}$$

và bổ chính bậc đầu tiên là

$$\begin{aligned}E' &= \left\langle \psi(r,\theta,\varphi) \left| \frac{e^2B^2}{8mc^4}(x^2+y^2) \right| \psi(r,\theta,\varphi) \right\rangle \\ &= \frac{e^2B^2}{8mc^2}\cdot\frac{1}{2\pi R_0}\int_0^{R_0} r^2\sin^2(kr)dr\int_0^{\theta} 2\pi\sin^3\theta d\theta \\ &= \left(\frac{1}{3}-\frac{1}{2\pi^2}\right)\frac{e^2B^2R_0^2}{12mc^2}\,.\end{aligned}$$

Chú ý rằng trong các tính toán ở trên, ta đã dùng

$$x^2+y^2=r^2\sin^2\theta,\ \sin(kR_0)=0 \text{ hay } kR_0=\pi\,.$$

(c) Giả sử có một điện trường đều $\mathbf{E}$ được đặt dọc theo trục z thay cho từ trường. Thế năng tương ứng của hạt là $V'=-eEz$, và nó được coi như một nhiễu loạn. Sự dịch chuyển của năng lượng trạng thái cơ bản khi đó là

$$E'_e=\langle\psi(r,\theta,\varphi)|-eEr\cos\theta|\psi(r,\theta,\varphi)\rangle\,.$$

Vì E'_e là âm, năng lượng của trạng thái cơ bản như vậy là giảm đi.

(d) Nếu thay cho từ yếu ta có một từ trường mạnh, khi đó

$$\hat{H}=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+\frac{e^2B^2}{8mc^2}(x^2+y^2)$$

Và số hạng $\mathbf{B}^2$ không thể coi như một nhiễu loạn được. Hạt bây giờ phải được xét như một dao động tử điều hòa hai chiều với

$$\frac{1}{2}m\omega^2=\frac{e^2B^2}{8mc^2},\quad \text{hay}\quad \omega=\frac{eB}{2mc}\,.$$

Như vậy, năng lượng của trạng thái cơ bản sẽ gần đúng bằng

$$E_0=\hbar\omega=\frac{eB}{2mc}\hbar\,.$$

5056

Một hạt khối lượng m có điện tích Q chuyển động trong một thế dao động tử điều hòa đẳng hướng ba chiều $V=\frac{1}{2}kr^2$.

(a) Tìm các mức năng lượng và bội suy biến của chúng?

(b) Nếu đặt thêm một điện trường đều, các mức năng lượng mới sẽ là bao nhiêu và bội suy biến sẽ như thế nào?

(c) Nếu thay cho điện trường ta đặt một từ trường đều, tìm các mức năng lượng của bốn trạng thái thấp nhất?

(*Columbia*)

Lời giải:

(a) Hamiltonian của hệ là

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}kr^2 = H_x + H_y + H_z,$$

trong đó

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2}kx_i^2 \quad (i = x, y, z)\,.$$

Các mức năng lượng được cho bởi

$$E_N = (N + 3/2)\hbar\omega_0\,,$$

trong đó $\omega_0 = \sqrt{k/m}$, $N = n_x + n_y + n_z$.

Bội suy biến của trạng thái N là

$$f = \sum_{n_x=0}^{N}(N - n_x + 1) = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)\,.$$

(b) Lấy phương của điện trường đều làm trục z. Khi đó, Hamiltonian là

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{\mathbf{p}}^2/2m + \frac{1}{2}kr^2 - QEz \\ &= \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2\right) + \left[\hat{p}_y^2/2m + \frac{1}{2}ky^2\right] \\ &\quad + \left[\hat{p}_z^2/2m + \frac{1}{2}k(z - QE/k)^2\right] - Q^2E^2/2k\,.\end{aligned}$$

So sánh với Hamiltonian ở câu (a) ta có

$$E_N = (N + 3/2)\hbar\omega_0 - Q^2E^2/2k\,,$$

$$f = \frac{1}{2}(N+1)(N+2).$$

(c) Xét trường hợp khi một từ trường thay cho một điện trường được đặt lên hệ. Trong tọa độ trụ, thế vectơ có các thành phần

$$A_\varphi = \frac{1}{2} B\rho, \quad A_\rho = A_z = 0\,.$$

Như vậy, Hamiltonian là

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{Q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + V \\ &= \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{Q}{mc}\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A} + \frac{Q^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + \frac{1}{2}k\rho^2 + \frac{1}{2}kz^2\,,\end{aligned}$$

trong đó ta đã sử dụng $r^2 = \rho^2 + z^2$, và $\nabla\cdot\mathbf{A} = 0$ mà điều đó có nghĩa là $\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A} = \mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}$. Viết

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_t^2 + \frac{1}{2}m\omega'^2\rho^2\right] + \left[\frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{1}{2}kz^2\right] - \frac{Q}{|Q|}\omega\hat{L}_z \\ &= \hat{H}_t + \hat{H}_z \mp \omega\hat{L}_z\,,\end{aligned}$$

trong đó

$$\nabla_t^2 = \nabla_x^2 + \nabla_y^2,\ \omega = |Q|B/2mc,\ \omega'^2 = \omega^2 + \omega_0^2,\ \hat{L}_z = \hat{p}_z\rho\,,$$

và kí hiệu $\mp$ tương ứng với giá trị dương hoặc âm của Q. Như một phần của Hamiltonian, $\hat{H}_t$ tương ứng với một dao động tử điều hòa hai chiều vuông góc với trục z, $\hat{H}_z$ tương ứng với một dao động tử điều hòa một chiều dọc theo trục z. Như vậy, các mức năng lượng của hệ được cho bởi

$$\begin{aligned}E_{n_\rho n_z m} &= (2n_\rho + 1 + |m|)\hbar\omega' + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 \mp m\hbar\omega \\ &= \left(\hbar\omega' + \frac{1}{2}\hbar\omega_0\right) + 2n_\rho\hbar\omega' + |m|\hbar\omega' \mp m\hbar\omega + n_z\hbar\omega_0\,,\end{aligned}$$

trong đó

$$\begin{aligned}n_\rho &= 0, 1, 2, \dots\,, \\ n_z &= 0, 1, 2, \dots\,, \\ m &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots\,.\end{aligned}$$

Do đó, bốn mức năng lượng thấp nhất là

$$E_{000} = \hbar\omega' + \frac{1}{2}\hbar\omega_0 ,$$

$$E_{001} = \hbar\omega' + \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + \hbar(\omega' - \omega) = 2\hbar\omega' - \hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega_0 ,$$

$$E_{010} = \hbar\omega' + \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + \hbar\omega_0 = \hbar\omega' + \frac{3}{2}\hbar\omega_0 ,$$

$$E_{002} = \hbar\omega' + \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + 2\hbar(\omega' - \omega) = 3\hbar\omega' - 2\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega_0 .$$

5057

(a) Hãy mô tả sự tách mức năng lượng nguyên tử gây bởi từ trường yếu. Trong thảo luận của mình, bạn bàn đến cả thừa số Landé (giả sử có liên kết LS).

(b) Hãy mô tả sự tách mức trong một từ trường mạnh (hiệu ứng Pashen - Back).

(Columbia)

Lời giải:

Trong liên kết LS, mômen từ của hệ nguyên tử là tổng đóng góp của mômen quỹ đạo và mômen spin

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{\mu}} &= \mu_0(g_l\hat{\mathbf{l}} + g_s\hat{\mathbf{s}}) \\ &= \mu_0[g_l\mathbf{j} + (g_s - g_l)\hat{\mathbf{s}}] ,\end{aligned}$$

trong đó μ_0 là magneton Bohr. Lấy phương của từ trường làm trục z, sự thay đổi gây bởi từ trường là

$$\hat{H}_1 = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} = -g_l\mu_0 B j_z - (g_s - g_l)\mu_0 B s_z .$$

(a) Hamiltonian của hệ là

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + V(r) + \xi(r)\hat{\mathbf{s}}\cdot\hat{\mathbf{l}} + \hat{H}_1 .$$

Xét $-(g_s - g_l)\mu_0 B s_z$ như nhiễu loạn và tác dụng $(H_0 - g_l\mu_0 B j_z)$ lên trạng thái riêng chung của $\hat{\mathbf{l}}^2$, $\hat{\mathbf{j}}^2$ và $\hat{j}_z$ ta có

$$(\hat{H}_0 - g_l\mu_0 B\hat{j}_z)\psi_{nljm_j} = (E_{nlj} - g_l\mu_0 B m_j)\psi_{nljm_j} .$$

Nếu B rất yếu, thì

$$\bar{s}_z = \frac{\hbar}{2}\langle jm_j|\hat{\sigma}_z|jm_j\rangle = \begin{cases} \dfrac{m_j}{2j} & \text{đối với} \quad j = l + \frac{1}{2}, \\ \dfrac{-m_j}{2(j+1)} & \text{đối với} \quad j = l - \frac{1}{2}, \end{cases}$$

trong đó, ta đã sử dụng các hệ thức

$$|jm_j\rangle = \sqrt{\frac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}\left|m_j - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \mp \sqrt{\frac{l \mp m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}\left|m_j + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$$

đối với $j = l \pm \frac{1}{2}$, và

$$\sigma_z\left|m_j \mp \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle = \pm\left|m_j \mp \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle.$$

Do đó, mức năng lượng của hệ trở thành

$$E_{nljm_j} \approx E_{nlj} - g_l\mu_0 Bm_j$$

$$-(g_s - g_l)\mu_0 B \begin{cases} \dfrac{m_j}{2j}, & j = l + \frac{1}{2}, \\ \dfrac{-m_j}{(2j+2)}, & j = l - \frac{1}{2}. \end{cases}$$

Vì $g_l = -1$, $g_s = -2$ ta có thể viết

$$E_{nljm_j} \approx E_{nlj} - g\mu_0 Bm_j,$$

trong đó

$$g = -\left[1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}\right]$$

là thừa số Landé. Như vậy, một mức năng lượng của nguyên tử được tách thành $(2j+1)$ mức.

(b) Nếu từ trường rất mạnh, ta có thể bỏ qua số hạng $\xi(r)\mathbf{s}\cdot\mathbf{l}$ và Hamiltonian của hệ là

$$\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + V(r) + \hat{H}_1 = \hat{H}_0 + \hat{H}_1.$$

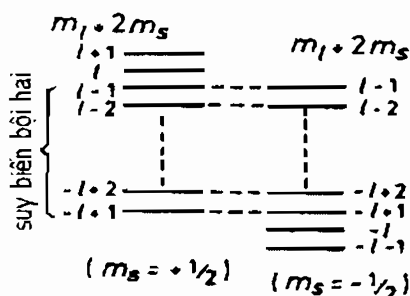
Tác dụng $\hat{H}$ lên trạng thái riêng chung của $(\hat{H}_0, \hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_z, \hat{\mathbf{s}}^2, s_z)$, ta được

$$\hat{H}\psi_{nlm_lm_S} = E_{nlm_lm_S}\psi_{nlm_lm_S},$$

trong đó

$$E_{nlm_lm_S} = E_{nl} - g_l\mu_0 Bm_l - g_s\mu_0 Bm_S$$
$$= E_{nl} + \mu_0 B(m_l + 2m_S)\,,$$

vì $g_l = -1$, $g_s = -2$. Đối với một điện tử, $m_S = \pm\frac{1}{2}$. Như vậy, do quy tắc lọc lựa $\Delta m_S = 0$, chuyển dời chỉ có thể xảy ra giữa các mức năng lượng có $m_S = +\frac{1}{2}$ và giữa các mức năng lượng có $m_S = -\frac{1}{2}$. Sự tách mức đối với một giá trị cho trước của l được diễn tả trong Hình 5.18. Đối với hai hệ mức năng lượng với $m_l + 2m_S = -l+1$ đến $l-1$ (một tập hợp với $m_S = \frac{1}{2}$, tập hợp khác với $m_S = -\frac{1}{2}$, nghĩa là, $2l-1$ mức cho mỗi tập hợp), còn có một suy biến bội hai. Do đó, số lượng tổng cộng các mức năng lượng là $2(2l+1)-(2l-1) = 2l+3$ như trong hình đã vẽ.



Hình 5.18

5058

Xét một nguyên tử với một electron hóa trị. Hamiltonian cấu trúc tinh tế của nó được cho bằng $\xi\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$.

(a) Hãy xác định hiệu giữa các mức năng lượng đặc trưng bởi $J = L + 1/2$ và $J = L - 1/2$ (khoảng cấu trúc tinh tế) theo ξ.

(b) Nguyên tử này được đặt vào một từ trường ngoài yếu với độ lớn là H. Hãy sử dụng lý thuyết nhiễu loạn để xác định sự tách mức năng lượng giữa các mức từ (Zeeman) gần kề của nguyên tử.

(c) Hãy mô tả định tính xem sự thể sẽ thay đổi thế nào nếu từ trường là rất mạnh.

(Columbia)

Lời giải:

(a) Trong biểu diễn của $(\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{L}}^2, j_z)$,

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} &= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) \\ &= \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \\ &= \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right].\end{aligned}$$

Vì $(l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2}) - (l-\frac{1}{2})(l+\frac{1}{2}) = 2l+1$, hiệu năng lượng là

$$\Delta E = E_{j=l+\frac{1}{2}} - E_{j=l-\frac{1}{2}} = \overline{\xi(r)} \cdot \frac{\hbar^2}{2}(2l+1).$$

(b) Nếu nguyên tử được đặt vào một từ trường đều có cường độ H mà phương của nó được lấy làm trục z, Hamiltonian của hệ là

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(r) + \frac{eH}{2mc}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) + \xi(r)\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \\ &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(r) + \frac{eH}{2mc}\hat{j}_z + \xi(r)\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \cdot + \frac{eH}{2mc}\hat{S}_z \\ &\equiv \hat{H}_0 + \frac{eH}{2mc}\hat{S}_z,\end{aligned}$$

trong đó $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$.

Gọi ψ_{nljm_j} là trạng thái riêng chung của hệ $(\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{L}}^2, j_z)$ đối với Hamiltonian không nhiễu loạn $\hat{H}_o$. Khi đó

$$\hat{H}_0\psi_{nljm_j} = \left(E_{nlj} + m_j\frac{eH\hbar}{2mc}\right)\psi_{nljm_j}.$$

Để xét được hiệu ứng của số hạng nhiễu loạn $\frac{eH}{2mc}\hat{s}_z$ ta sẽ dùng tọa độ cầu

và viết $\psi_{nljm_j} = R_n(r)\varphi_{ljm_j}(\theta, \varphi)$, trong đó, phần hàm sóng góc là

$$\varphi_{ljm_j} = \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}}\,\alpha Y_{j-\frac{1}{2}, m_j-\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}}\,\beta Y_{j-\frac{1}{2}, m_j+\frac{1}{2}} \quad \text{for } j = l + \frac{1}{2},$$

$$\varphi_{ljm_j} = -\sqrt{\frac{j-m_j+1}{2j+2}}\,\alpha Y_{j+\frac{1}{2}, m_j-\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2j+2}}\,\beta Y_{j+\frac{1}{2}, m_j+\frac{1}{2}} \quad \text{for } j = l - \frac{1}{2},$$

ở đây α, β là trạng thái riêng của $\hat{S}_z$ tương ứng với giá trị riêng tương ứng $\frac{\hbar}{2}$ và $-\frac{\hbar}{2}$ Như vậy, với $j = l + \frac{1}{2}$,

$$\hat{S}_z\varphi_{ljm_j} \equiv \hat{S}_z|jm_j\rangle = \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}}\,\frac{\hbar}{2}\,\alpha Y_{j-\frac{1}{2}, m_j-\frac{1}{2}} - \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}}\,\frac{\hbar}{2}\,\beta Y_{j-\frac{1}{2}, m_j+\frac{1}{2}},$$

và

$$\langle jm_j|\hat{S}_z|jm_j\rangle = \frac{j+m_j}{2j}\,\frac{\hbar}{2} - \frac{j-m_j}{2j}\,\frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar}{2}\,\frac{m_j}{j},$$

còn đối với $j = l - \frac{1}{2}$

$$\langle jm_j|\hat{S}_z|jm_j\rangle = -\frac{\hbar}{2}\,\frac{m_j}{(j+1)}.$$

Do đó

$$\frac{eH}{2mc}\langle S_z\rangle = \frac{eH\hbar}{4mc}\begin{cases} m_j/j, & j = l + \dfrac{1}{2}, \\ -m_j/(j+1), & j = l - \dfrac{1}{2}, \end{cases}$$

và vì vậy

$$E_{nljm_j} = E_{nlj} + \frac{eH\hbar}{2mc}\begin{cases} \left(1 + \dfrac{1}{2j}\right) m_j, & j = l + \dfrac{1}{2}, \\ \left(1 - \dfrac{1}{2j+2}\right) m_j, & j = l - \dfrac{1}{2}. \end{cases}$$

Suy ra,

$$\Delta E = \begin{cases} \mu_B H \left(1 + \frac{1}{2j}\right), & j = l + \frac{1}{2}, \\ \mu_B H \left(1 - \frac{1}{2j+2}\right), & j = l - \frac{1}{2}, \end{cases}$$

trong đó $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ là magneton Bohr.

(c) Nếu từ trường là rất mạnh, $\xi(r)\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} \ll \mu_B B$ và Hamiltonian của hệ là

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) + \frac{eH}{2mc}(\hat{l}_z + 2\hat{S}_z).$$

Bởi vì $(\hat{H}_0, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z, \hat{\mathbf{S}}^2, S_z)$ tạo thành một hệ đầy đủ các biến động lực, nên

$$\begin{aligned} E_{nlmm_s} &= E_{nl} + \frac{eH}{2mc}\hbar(m + 2m_s) \\ &= E_{nl} + \mu_B H(m \pm 1), \end{aligned}$$

vì $m_s = \pm\frac{1}{2}$. Như vậy

$$\Delta E = \mu_B H.$$

5059

Positroni là một hệ giống như nguyên tử hydro được tạo thành từ một positron và một electron. Xét positroni trong trạng thái cơ bản ($l = 0$). Hamiltonian H có thể viết $H = H_0 + H_S + H_B$, trong đó H_0 là phần lực Coulomb quen thuộc không phụ thuộc vào spin, $H_S = A\mathbf{s}_p \cdot \mathbf{s}_e$ là phần sinh ra do tương tác giữa spin của positron và của electron, còn $H_B = -(\boldsymbol{\mu}_p + \boldsymbol{\mu}_e)\cdot\mathbf{B}$ là phần sinh ra từ tương tác với từ trường ngoài đặt thêm $\mathbf{B}$.

(a) Khi chưa đặt thêm từ trường ngoài, cách chọn nào cho hàm riêng của mômen spin và mômen góc là thích hợp? Hãy tính sự dịch chuyển năng lượng cho mỗi trạng thái của H_S.

(b) Đặt thêm vào một từ trường rất yếu ($H_B \ll H_S$). Tìm những mức năng lượng khả dĩ trong trường hợp này?

(c) Bây giờ giả sử từ trường tăng dần đến khi $H_B \gg H_S$. Hàm sóng riêng thích hợp nhất là loại nào? Tìm sự dịch chuyển năng lượng cho mỗi trạng thái gây ra bởi H_B?

(d) Hãy chỉ ra cách thức giải bài toán tìm năng lượng và hàm riêng cho trường hợp tổng quát; tuy nhiên bạn không nên cố thực hiện các tính toán đại số trừ trường hợp bạn không biết làm gì tốt hơn. Xin đừng cố gắng quá.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Khi không có từ trường ngoài **B** coi H_s là một nhiễu loạn. Spin toàn phần của hệ là $\mathbf{S} = \mathbf{s}_p + \mathbf{s}_e$ và như vậy

$$\mathbf{s}_p \cdot \mathbf{s}_e = \frac{1}{2}\left(\mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_p^2 - \mathbf{s}_e^2\right) = \frac{1}{2}\left[S(S+1) - s_p(s_p+1) - s_e(s_e+1)\right].$$

Thích hợp nhất là chọn hàm riêng dưới dạng $|lmSS_z\rangle$. Trạng thái cơ bản $l = 0$ tạo nên từ bốn trạng thái $S = 1$, $S_z = 0, \pm 1$; $S = 0$, $S_z = 0$. Với $l = 0$, $S = 1$, vì

$$A\mathbf{s}_p \cdot \mathbf{s}_e |lm1S_z\rangle = \frac{A}{2}\left[1(1+1) - \frac{3}{2}\right]\hbar^2 |lm1S_z\rangle,$$

ta có

$$E_s = \langle lm1S_z|H_s|lm1S_z\rangle = \frac{A\hbar^2}{4}, \quad (S_z = 0, \pm 1),$$

và đó chính là độ chuyển dịch cho trạng thái tam tuyến. Với $l = 0$, $S = 0$, vì

$$H_S|lm00\rangle = \frac{A}{2}\left(0 - \frac{3}{2}\right)\hbar^2 |lm00\rangle,$$

độ chuyển dịch của năng lượng là $-\frac{3}{4}A\hbar^2$.

(b) Khi trường ngoài **B** được đặt vào, nhưng với $H_B \ll H_S$ ta có thể coi hiệu ứng của trường ngoài là nhiễu loạn ($H = (H_0 + H_s) + H_B$). Lấy $|lmSS_z\rangle$ làm vectơ trạng thái và phương của **B** là trục z, nghĩa là, ta có $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$,

$$H_B = -(\boldsymbol{\mu}_p + \boldsymbol{\mu}_e) \cdot \mathbf{B} = \frac{eB}{mc}\left(\hat{s}_{ez} - \hat{s}_{pz}\right),$$

và (xem **Bài tập 5066 (b)**)

$$H_B|0000\rangle = \frac{eB\hbar}{mc}|0010\rangle, \quad H_B|0011\rangle = 0,$$

$$H_B|0010\rangle = \frac{eB\hbar}{mc}|0000\rangle, \quad H_B|001,-1\rangle = 0.$$

Do đó $\langle lmSS_z|H_B|lmSS_z\rangle = 0$ và các mức năng lượng sẽ không có sự thay đổi gì thêm, so với sự tách mức thành các trạng thái đơn tuyến và tam tuyến như đã trình bày trong (a) khi xét đến bậc nhất của nhiễu loạn.

Ta có

$$E_n = E_n^{(0)} + \sum_{i\neq n}{}' \frac{|\langle n|H_B|i\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} .$$

Vì chỉ các yếu tố ma trận sau đây là khác không

$$\langle 0010|H_B|0000\rangle = \frac{eB\hbar}{mc}$$

$$\langle 0000|H_B|0010\rangle = \frac{eB\hbar}{mc} ,$$

các mức năng lượng đến nhiễu loạn bậc hai đối với $|0000\rangle$ là

$$E_1 = -\frac{3}{4}A\hbar^2 + \left(\frac{eB\hbar}{mc}\right)^2 \Big/ \left(-\frac{3}{4}A\hbar^2 - \frac{1}{4}A\hbar^2\right)$$

$$= -\frac{3}{4}A\hbar^2 - \frac{1}{A}\left(\frac{eB}{mc}\right)^2 ,$$

đối với $|0011\rangle$ và $|001,-1\rangle$ là

$$E_2 = E_4 = \frac{1}{4}A\hbar^2 ,$$

và đối với $|0010\rangle$ là

$$E_3 = \frac{1}{4}A\hbar^2 + \left(\frac{eB\hbar}{mc}\right)^2 \Big/ \left(\frac{1}{4}A\hbar^2 + \frac{3}{4}A\hbar^2\right)$$

$$= \frac{1}{4}A\hbar^2 + \frac{1}{A}\left(\frac{eB}{mc}\right)^2 .$$

(c) Bây giờ nếu $H_B \gg H_S$, ta có thể bỏ qua số hạng H_s và chỉ coi nhiễu loạn như được tạo thành từ $H_B = \frac{eB}{mc}(\hat{s}_{ez} - \hat{s}_{pz})$. Khi đó, việc chọn $|lms_{ez}s_{pz}\rangle$ làm hệ hàm riêng tỏ ra tiện lợi hơn. Như vậy, đối với trạng thái $|lm, \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$, ta có

$$(\hat{s}_{ez} - \hat{s}_{pz})\left|\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle = \hat{s}_{ez}\left|\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle - \hat{s}_{pz}\left|\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$= \left[\pm\frac{\hbar}{2} - \left(\pm\frac{\hbar}{2}\right)\right]\left|\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle = 0$$

và chuyển dịch năng lượng tương ứng là bằng không. Đối với trạng thái $|lm, \pm\frac{1}{2}, \mp\frac{1}{2}\rangle$, ta có

$$H_B\left|\pm\frac{1}{2}, \mp\frac{1}{2}\right\rangle = \pm\frac{eB\hbar}{mc}\left|\pm\frac{1}{2}, \mp\frac{1}{2}\right\rangle,$$

và do đó, chuyển dịch năng lượng là $\pm\frac{eB\hbar}{mc}$.

(d) Trong trường hợp tổng quát, lấy $|lmSS_z\rangle$ làm vectơ trạng thái và $H' = H_S + H_B$ làm Hamiltonian nhiễu loạn. Khi đó bài toán sẽ được giải quyết bằng phương pháp nhiễu loạn cho các trạng thái suy biến, nghĩa là, giải phương trình trường kì $\det|H'_{mn} - E\delta_{mn}| = 0$ để tìm bổ chính năng lượng và các hàm sóng tương ứng.

5060

Một nguyên tử ở trong một trạng thái có spin electron toàn phần S, mômen quỹ đạo toàn phần L và mômen xung lượng toàn phần J. (Spin hạt nhân có thể bỏ qua trong bài toán này). Thành phần z của mômen xung lượng toàn phần nguyên tử là J_z. Năng lượng của trạng thái nguyên tử sẽ thay đổi bao nhiêu nếu đặt thêm một từ trường ngoài yếu với cường độ B và có phương dọc theo trục z? Giả sử tương tác với từ trường là nhỏ so với tương tác của cấu trúc tinh tế.

Câu trả lời sẽ được cho bằng những biểu thức tường minh theo các số lượng tử J, L, S, J_z và các hằng số quen thuộc.

(Princeton)

Lời giải:

Hamiltonian và các hàm riêng trước khi đưa vào từ trường là

$$\hat{H} = \hat{H}_0,$$

$$\psi_{nLJM_J} = R_{nLJ}(r_1, \ldots, r_n)\,\phi_{SLJM_J},$$

trong đó, các chỉ số dưới của r, $1, 2, \ldots, n$, mô tả các electron khác nhau trong nguyên tử, còn ϕ_{SLJM_J} là trạng thái riêng chung của hệ $(\mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}^2, J_z)$, nghĩa là,

$$\phi_{SLJM_J} = \sum_{M_L}\langle LM_LS, M_J - M_L|JM_J\rangle Y_{LM_L}\Theta_{S,M_J-M_L},$$

$\langle LM_LS, M_J - M_L|JM_J\rangle$ là hệ số Clebsch - Gordan. Năng lượng không nhiễu loạn tương ứng là E_{nSLJ}.

Sau khi có từ trường yếu, Hamiltonian trở thành

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{eB}{2m_e c}\hat{J}_z + \frac{eB}{2m_e c}\hat{S}_z\,.$$

Vì B là rất nhỏ, ta có thể coi $(\mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}^2, J_z)$ là các đại lượng bảo toàn và lấy hàm sóng của hệ gần đúng là ψ_{nLJM_J}. Sự thay đổi năng lượng sinh ra do số hạng $\frac{eB}{2mc}J_z$ là $\Delta E_1 = M_J\hbar\frac{eB}{2mc}$ vì J_z có giá trị riêng là $M_J\hbar$. Ma trận của $\frac{eB}{2mc}S_z$ có dạng đường chéo trong không gian con sinh bởi $2J+1$ vectơ trạng thái đối với năng lượng E_{nLJ}, và do đó, sự thay đổi của năng lượng do nó gây ra là

$$\Delta E_2 = \frac{eB}{2mc}\langle\hat{S}_z\rangle = \frac{eB}{2mc}\langle JM_J|\hat{S}_z|JM_J\rangle\,,$$

trong đó

$$\langle JM_J|\hat{S}_z|JM_J\rangle = \sum_{M_L}\hbar(M_J - M_L)[\langle LM_L S, M_J - M_L|JM_J\rangle]^2\,.$$

Sự thay đổi toàn phần của năng lượng là

$$\Delta E = M_J\hbar\omega_l - \hbar\omega_l + \sum_{M_L}(M_J - M_L)\cdot[\langle LM_L S, M_J - M_L|JM_J\rangle]^2\,,$$

trong đó

$$w_l = \frac{eB}{2mc}\,.$$

5061

Đơteron là một trạng thái liên kết của một proton và một nơtron. Hamiltonian trong hệ khối tâm có dạng

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V_1(r) + \boldsymbol{\sigma}_p\cdot\boldsymbol{\sigma}_n V_2(r) + \left[\left(\boldsymbol{\sigma}_p\cdot\frac{\mathbf{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\frac{\mathbf{x}}{r}\right) - \frac{1}{3}(\boldsymbol{\sigma}_p\cdot\boldsymbol{\sigma}_n)\right]V_3(r)\,.$$

ở đây, $\mathbf{x} = \mathbf{x}_n - \mathbf{x}_p$, $r = |\mathbf{x}|$, $\boldsymbol{\sigma}_p$ và $\boldsymbol{\sigma}_n$ là các ma trận Pauli cho spin của proton và của nơtron, μ là khối lượng rút gọn, và $\mathbf{p}$ là liên hợp của $\mathbf{x}$.

(a) Mômen xung lượng toàn phần $\mathbf{J}^2 = J(J+1)$ và tính chẵn lẻ là những số lượng tử tốt. Hãy chứng tỏ rằng nếu $V_3 = 0$, mômen quỹ đạo toàn phần $\mathbf{L}^2 = L(L+1)$, spin toàn phần $\mathbf{S}^2 = S(S+1)$ và $\mathbf{S} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_p + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_n$ là các số

lượng tử tốt. Chứng tỏ rằng nếu $V_3 \neq 0, S$ vẫn là một số lượng tử tốt (Điều này giúp cho việc xét sự hoán vị spin của proton và nơtron).

(b) Đơteron có $J = 1$ và tính chẵn lẻ dương. Những giá trị nào là khả dĩ đối với L? Những giá trị nào khả dĩ đối với S?

(c) Giả sử rằng V_3 có thể coi như một nhiễu loạn nhỏ. Chứng tỏ rằng, trong gần đúng bậc không (nghĩa là $V_3 = 0$) hàm sóng của trạng thái với $J_z = +1$ có dạng $\psi_0(r)|\alpha, \alpha\rangle$ trong đó $|\alpha, \alpha\rangle$ là trạng thái spin với $s_{pz} = s_{nz} = +1/2$. Đâu là phương trình cho $\psi_0(r)$?

(d) Tìm chuyển dịch bậc nhất cho năng lượng theo V_3? Giả sử rằng, hàm sóng bậc nhất là

$$\psi_0(r)|\alpha, \alpha\rangle + \psi_1(\mathbf{x})|\alpha, \alpha\rangle + \psi_2(\mathbf{x})(|\alpha, \beta\rangle + |\beta, \alpha\rangle) + \psi_3(\mathbf{x})|\beta, \beta\rangle ,$$

trong đó $|\beta\rangle$ là trạng thái với $S_z = -1/2$ và ψ_0 được định nghĩa như trong phần (c). Bằng cách chọn lọc phần của phương trình Schrödinger chứa bậc nhất theo V_3 và phần tỉ lệ với $|\alpha, \alpha\rangle$, hãy tìm phương trình vi phân mà $\psi_1(\mathbf{x})$ phải thỏa mãn. Tách riêng phần phụ thuộc góc của $\psi_1(\mathbf{x})$ và viết phương trình vi phân cho phần phụ xuyên tâm.

(*MIT*)

Lời giải:

(a) Sử dụng hệ đơn vị trong đó $\hbar = 1$. Trước hết ta xét trường hợp khi $V_3 = 0$. Bởi vì

$$\mathbf{p}^2 = -\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{1}{r^2}\nabla^2_{\theta,\varphi}, \ \mathbf{L}^2 = -\nabla^2_{\theta,\varphi} ,$$

ta có

$$[\mathbf{L}^2, \mathbf{p}^2] = 0 ,$$

$$[\mathbf{L}^2, V_1 + (\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \boldsymbol{\sigma}_n)V_2] = [\mathbf{L}^2, V_1] + (\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \boldsymbol{\sigma}_n)[\mathbf{L}^2, V_2]$$
$$= 0 + (\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \boldsymbol{\sigma}_n) \cdot 0 = 0 ,$$

suy ra

$$[\mathbf{L}^2, H_{V_3=0}] = 0 .$$

Như vậy, $\mathbf{L}^2$ là một số lượng tử tốt. Bây giờ ta xét trường hợp spin toàn phần $\mathbf{S}^2$. Vì

$$\mathbf{s}_p \cdot \mathbf{s}_n = \frac{1}{2}(\mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_p^2 - \mathbf{s}_n^2) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{S}^2 - \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{S}^2 - \frac{3}{2}\right) ,$$

$$\mathbf{s}_p = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_p, \quad \mathbf{s}_n = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_n,$$

ta có

$$[\mathbf{S}^2, \sigma_p \cdot \sigma_n] = \frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\sigma}_p \cdot \sigma_n] = 0,$$

Hơn thế nữa,

$$[\mathbf{S}^2, \mathbf{p}^2] = 0, \quad [\mathbf{S}^2, V_1(r)] = 0.$$

Do đó $[\mathbf{S}^2, H_{V_3-0}] = 0$ và $\mathbf{S}^2$ cũng là một số lượng tử tốt.

Nếu $V_3 \neq 0$, ta cũng cần xét

$$\left(\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right) = \frac{1}{2}\left\{\left[(\boldsymbol{\sigma}_p + \boldsymbol{\sigma}_n)\cdot\frac{\mathbf{x}}{r}\right]^2 - \left(\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right)^2 - \left(\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right)^2\right\}.$$

Vì $\boldsymbol{\sigma}_p + \boldsymbol{\sigma}_n = 2(\mathbf{s}_p + \mathbf{s}_n) = 2\mathbf{S}$ và

$$\left(\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right)^2 = \left(\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right) = \frac{\mathbf{x}}{r}\cdot\frac{\mathbf{x}}{r} = 1 = \left(\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right)^2,$$

sử dụng công thức

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}) = \mathbf{A}\cdot\mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{A}\times\mathbf{B}),$$

công thức trên trở thành

$$\left(\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right) = 2\left(\mathbf{S}\cdot\frac{\mathbf{x}}{r}\right)^2 - 1.$$

Khi đó, vì

$$\left[\mathbf{S}^2, \left(\mathbf{S}\cdot\frac{\mathbf{x}}{r}\right)\right] = \sum_i [\mathbf{S}^2, S_i]\left(\frac{x_i}{r}\right) = 0,$$

ta có

$$\left[\mathbf{S}^2, \left(\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right)\right] = 0.$$

và do đó

$$[\mathbf{S}^2, H] = 0, \quad [S, H] = 0.$$

Như vậy, S vẫn còn là một số lượng tử tốt khi $V_3 \neq 0$.

(b) Tính chẵn lẻ của đơteron là

$$P = P(p)\cdot P(n)\cdot P_L = (+1)\cdot(+1)\cdot(-1)^L = (-1)^L.$$

Vì tính chẵn lẻ là dương, L =chẵn. Khi đó, vì S có thể bằng 0 hoặc 1 và $J = 1$, ta có S bằng 1 và L bằng 0 hoặc 2.

(c) Trong nhiễu loạn bậc không $V_3 = 0$, L, S là các số lượng tử tốt.

Đối với trạng thái thấp nhất, $L = 0$ và do đó $L_z = 0$. Khi đó đối với trạng thái $J_z = L_z + S_z = 1$, $S_z = 1$ và như vậy $S = 1$, $s_{pz} = +\frac{1}{2}$, $s_{nz} = +\frac{1}{2}$. Bởi vì $L = 0$, hàm sóng không gian có đối xứng cầu, nghĩa là, $\psi_0 = \psi_0(r)$. Như vậy, hàm sóng của trạng thái $J_z = 1$ là $\psi_0(r)$, và

$$H\psi_0(r)|\alpha, \alpha\rangle = E\psi_0(r)|\alpha, \alpha\rangle .$$

Bởi vì

$$\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \boldsymbol{\sigma}_n = 4\mathbf{s}_p \cdot \mathbf{s}_n = 2\mathbf{S}^2 - 2\mathbf{s}_p^2 - 2\mathbf{s}_n^2 = 2\mathbf{S}^2 - 3 ,$$

và do đó

$$\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \sigma_n|\alpha, \alpha\rangle = (2\mathbf{S}^2 - 3)|\alpha, \alpha\rangle = (2 \times 2 - 3)|\alpha, \alpha\rangle = |\alpha, \alpha\rangle ,$$

ta có

$$H\psi_0(r)|\alpha, \alpha\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + V_1(r)\right] \times \psi_0(r)|\alpha, \alpha\rangle + V_2(r)\psi_0(r)|\alpha, \alpha\rangle .$$

Do đó, phương trình vi phân mà ψ_0 phải thỏa mãn là

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\psi_0}{dr}\right) + \left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V_1(r) - V_2(r)]\right\}\psi_0 = 0 .$$

Với $L \neq 0$, hàm sóng của trạng thái có $J_z = 1$ sẽ không còn có dạng như trên.

(d) Trong gần đúng bậc đầu tiên, ta viết Hamiltonian của hệ như sau

$$H = H_0 + H' ,$$

trong đó

$$H' = \left[\left(\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \frac{\mathbf{x}}{r}\right) - \frac{1}{3}\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \sigma_n\right] V_3(r), \quad H_0 = H_{V_3=0} ,$$

và hàm sóng là

$$\psi = \psi_0|\alpha, \alpha\rangle .$$

Bổ chính cho năng lượng được cho bằng

$$\Delta E = \langle \psi | H' | \psi \rangle .$$

Vì

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{x}}{r} = \sigma_x \sin\theta \cos\varphi + \sigma_y \sin\theta \sin\varphi + \sigma_z \cos\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix},$$

$$\langle \alpha | \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{x}}{r} | \alpha \rangle = (1 \quad 0) \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \cos\theta ,$$

ta có

$$\langle \alpha, \alpha | \left(\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \frac{\mathbf{x}}{r} \right) \left(\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \frac{\mathbf{x}}{r} \right) - \frac{1}{3} \boldsymbol{\sigma}_p \cdot \sigma_n | \alpha, \alpha \rangle = \cos^2\theta - \frac{1}{3} ,$$

và do đó

$$\begin{aligned} \Delta E &= \langle \psi | H' | \psi \rangle \\ &= \int |\psi_0|^2 V_3(r) \left(\cos^2\theta - \frac{1}{3} \right) d\mathbf{x} \\ &= \int_0^\infty V_3(r) |\psi_0|^2 r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(\cos^2\theta - \frac{1}{3} \right) \sin\theta d\theta d\varphi \\ &= 0 . \end{aligned}$$

Chú ý rằng, vì **S** là bảo toàn và **L** thì không, hàm sóng là sự chồng chập của các trạng thái tam tuyến spin ($S = 1$)

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}) = \psi_0(r) |\alpha, \alpha\rangle + \psi_1(\mathbf{x}) |\alpha, \alpha\rangle + \psi_2(\mathbf{x}) \left(|\alpha, \beta\rangle \right. \\ \left. + |\beta, \alpha\rangle \right) + \psi_3(\mathbf{x}) |\beta, \beta\rangle , \end{aligned}$$

và

$$H\psi = (H_0 + H')\psi = (E + E^{(1)} + \cdots)\psi .$$

Như vậy, ở gần đúng bậc nhất, sử dụng

$$E^{(1)} = \Delta E = 0$$

và

$$H_0 \psi_0 |\alpha, \alpha\rangle = E \psi_0 |\alpha, \alpha\rangle ,$$

ta thu được

$$H_0[\psi_1|\alpha,\alpha\rangle + \psi_2(|\alpha,\beta\rangle + |\beta,\alpha\rangle) + \psi_3|\beta,\beta\rangle] + H'\psi_0|\alpha,\alpha\rangle$$
$$= E[\psi_1|\alpha,\alpha\rangle + \psi_2(|\alpha,\beta\rangle + |\beta,\alpha\rangle) + \psi_3|\beta,\beta\rangle] .$$

Để tính số hạng nhiễu loạn $H'\psi_0|\alpha,\alpha\rangle$:

$$H'\psi_0|\alpha,\alpha\rangle = V_3(r)\psi_0\left[\left(\boldsymbol{\sigma}_p\cdot\frac{\mathbf{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\frac{\mathbf{x}}{r}\right) - \frac{1}{3}(\boldsymbol{\sigma}_p\cdot\boldsymbol{\sigma}_n)\right]|\alpha,\alpha\rangle$$
$$= V_3(r)\psi_0\left[\begin{pmatrix}\cos\theta\\ \sin\theta e^{i\varphi}\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}\cos\theta\\ \sin\theta e^{i\varphi}\end{pmatrix}_n - \frac{1}{3}|\alpha\alpha\rangle\right] .$$

Vì

$$\begin{pmatrix}\cos\theta\\ \sin\theta e^{i\varphi}\end{pmatrix} = \cos\theta\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \sin\theta e^{i\varphi}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$
$$= \alpha\cos\theta + \beta\sin\theta e^{i\varphi} ,$$

$$H'\psi_0|\alpha,\alpha\rangle = V_3(r)\psi_0\left[\cos^2\theta - \frac{1}{3}\right]|\alpha,\alpha\rangle + V_3(r)\psi_0\sin^2\theta e^{i2\varphi}|\beta,\beta\rangle .$$

Bằng cách xét những số hạng trong phương trình trên, tỉ lệ với $|\alpha,\alpha\rangle$, ta có thể thu được phương trình cho hàm sóng $\psi_1(\mathbf{x})$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2}\right)\psi_1(\mathbf{x}) + V_1(r)\psi_1$$
$$+ V_2(r)\psi_1 + V_3(r)\psi_0(r)\left(\cos^2\theta - \frac{1}{3}\right) = E\psi_1 .$$

Bằng cách viết $\psi_1(\mathbf{x}) = R_1(r)\Phi_1(\theta,\varphi)$, ta thu được từ hệ thức trên

$$\Phi_1(\theta,\varphi) = \cos^2\theta - \frac{1}{3} = \frac{1}{3}\sqrt{\frac{16\pi}{5}}\,Y_{20}(\theta,\varphi) .$$

và như vậy $\hat{L}^2\Phi_1 = 2(2+1)\hbar^2\Phi_1$. Phương trình cho R_1 là

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_1}{dr}\right) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - V_1(r) - V_2(r) - \frac{6}{r^2}\right]R_1$$
$$= \frac{2\mu}{\hbar^2}V_3(r)\psi_0(r) .$$

Ở đây, cần nhận xét rằng, mặc dù hệ số chuẩn hóa của Φ_1 có ảnh hưởng đến hệ số chuẩn hóa của R_1, nhưng tích của chúng vẫn như cũ. Cũng cần nói thêm rằng $\psi_1(\mathbf{x})$ tương ứng với $L = 2$, $L_z = 0$. Bằng cách xét số hạng trong $H'\psi_0|\alpha\alpha\rangle$ tỉ lệ với $|\beta, \beta\rangle$, ta sẽ thấy rằng $\psi_3(\mathbf{x})$ tương ứng với $L = 2$, $L_z = 2$. Khi đó, từ $J_z = 1$, ta sẽ thấy rằng $\psi_2(\mathbf{x})$ tương ứng với $L = 2$, $L_z = 1$ (chú ý rằng J_z vẫn bảo toàn nếu $V_3 \neq 0$). Nói một cách khác, việc tồn tại của V_3 đòi hỏi trạng thái cơ bản của đơteron phải là tổ hợp của các trạng thái $L = 0$ và $L = 2$, sao cho $J = 1$, $S = 1$, $J_z = 1$ và tính chẵn lẻ = dương.

5062

Xét những trạng thái liên kết của một hệ được tạo nên từ hai hạt không đồng nhất, phi tương đối tính, spin 1/2 và tương tác thông qua trường thế có đối xứng xuyên tâm không phụ thuộc vào spin. Ta đặc biệt chú ý các mức $^3P_2$ và $^1P_1$ ($^3P_2$: là tam tuyến spin, $L = 1$, $J = 2$; $^1P_1$: là đơn tuyến spin, $L = 1$, $J = 1$). Một số hạng lực dạng tenxơ $H' = \lambda[3\boldsymbol{\sigma}(1)\cdot\hat{\mathbf{r}}\,\boldsymbol{\sigma}(2)\cdot\hat{\mathbf{r}} - \boldsymbol{\sigma}(1)\cdot\boldsymbol{\sigma}(2)]$ được thêm vào Hamiltonian như một nhiễu loạn, trong đó λ là một hằng số, còn $\hat{\mathbf{r}}$ là vectơ đơn vị dọc theo đường nối hai hạt, $\boldsymbol{\sigma}(1)$ và $\boldsymbol{\sigma}(2)$ là các toán tử spin Pauli cho hạt 1 và 2.

(a) Sử dụng tính chất H' giao hoán với tất cả các thành phần của mômen xung lượng toàn phần, hãy chứng tỏ rằng, năng lượng nhiễu loạn độc lập với m là giá trị riêng của J_z.

(b) Năng lượng thường được tính một cách dễ dàng cho trạng thái tam tuyến khi giá trị riêng của J_z có giá trị cực đại $m = j = 2$. Hãy tìm năng lượng nhiễu loạn $\Delta E(^3P_2)$.

(c) Hãy tìm $\Delta E(^1P_1)$.

(Princeton)

Lời giải:

(a) Ta sẽ dùng hệ đơn vị trong đó $\hbar = 1$. Vì $\mathbf{S} = \frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma}(1) + \boldsymbol{\sigma}(2)]$, Hamilto-

nian nhiễu loạn H' có thể viết thành

$$\begin{aligned} H' &= \lambda\left\{\frac{3}{2}\left[(2\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{r}})^2 - (\boldsymbol{\sigma}(1)\cdot\hat{\mathbf{r}})^2 - (\boldsymbol{\sigma}(2)\cdot\hat{\mathbf{r}})^2\right]\right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2}\left[4\mathbf{S}^2 - \boldsymbol{\sigma}(1)^2 - \boldsymbol{\sigma}(2)^2\right]\right\} \\ &= \lambda[6(\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{r}})^2 - 2\mathbf{S}^2]\,. \end{aligned}$$

trong đó ta đã sử dụng hệ thức

$$\begin{aligned} (\sigma\cdot\hat{\mathbf{r}})^2 &= (\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z) \\ &= \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = \sigma^2\,, \end{aligned}$$

thu được nhờ

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}\,.$$

Để chứng minh rằng H' giao hoán với tất cả các thành phần của mômen xung lượng toàn phần $\mathbf{J}$, ta sẽ chứng tỏ rằng, chẳng hạn $[J_z, H'] = 0$. Vì $[S_z, \mathbf{S}^2] = 0$, $[L_z, \mathbf{S}^2] = 0$, ta có $[J_z, \mathbf{S}^2] = 0$. Đồng thời, vì $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$, v.v., $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$, ta có

$$\begin{aligned} [J_z, \mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{r}}] &= [S_z, \mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{r}}] + [L_z, \mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{r}}] \\ &= [S_z, \sin\theta\cos\varphi S_x + \sin\theta\sin\varphi S_y + \cos\theta S_z] \\ &\quad + [L_z, \sin\theta\cos\varphi S_x + \sin\theta\sin\varphi S_y + \cos\theta S_z] \\ &= i\hbar\sin\theta\cos\varphi S_y - i\hbar\sin\theta\sin\varphi S_x \\ &\quad - i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}(\sin\theta\cos\varphi S_x + \sin\theta\sin\varphi S_y + \cos\theta S_z) \\ &= 0\,, \end{aligned}$$

và do đó

$$[J_z, (\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{r}})^2] = (\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{r}})[J_z, \mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{r}}] + [J_z, \mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{r}}](\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{r}}) = 0\,.$$

Kết hợp các kết quả trên, ta có $[J_z, H'] = 0$.

Tương tự, ta có thể chứng tỏ rằng

$$[J_x, H'] = [J_y, H'] = 0\,.$$

Điều đó kéo theo $J_+ = J_x + iJ_y$ cũng giao hoán với H'. J_+ có tính chất

$$J_+|j, m\rangle = a|j, m+1\rangle ,$$

trong đó a là một hằng số. Giả sử có hai trạng thái không nhiễu loạn

$$|j, m_1\rangle \quad \text{và} \quad |j, m_2\rangle, \quad \text{trong đó} \quad m_2 = m_1 + 1 ,$$

mà chúng là suy biến và năng lượng của chúng trong gần đúng bậc nhất của nhiễu loạn tương ứng là E_1 và E_2. Khi đó

$$\begin{aligned}
&\langle j, m_2|[J_+, H_0 + H']|j, m_1\rangle \\
&\quad = \langle j, m_2|J_+(H_0 + H')|j, m_1\rangle - \langle j, m_2|(H_0 + H')J_+|j, m_1\rangle \\
&\quad = (E_1 - E_2)\langle j, m_2|J_+|J, m_1\rangle \\
&\quad = a(E_1 - E_2) = 0
\end{aligned}$$

vì

$$\begin{aligned}
(H_0 + H')|j, m_1\rangle &= E_1|j, m_1\rangle , \\
(H_0 + H')J_+|j, m_1\rangle &= (H_0 + H')a|j, m_2\rangle \\
&= E_2 a|j, m_2\rangle = E_2 J_+|j, m_1\rangle .
\end{aligned}$$

Bởi vì yếu tố ma trận $a \neq 0$, nên $E_1 = E_2$, nghĩa là, năng lượng nhiễu loạn là độc lập với m.

(b) Năng lượng nhiễu loạn là

$$\Delta E(^3P_2) = \langle j = 2, m = 2|H'|j = 2, m = 2\rangle .$$

Bởi vì

$$|j = 2, m = 2\rangle = |l = 1, m_l = 1\rangle|S = 1, m_S = 1\rangle ,$$

$$\begin{aligned}
\Delta E(^3P_2) &= \int d\Omega Y_{11}^*(\theta, \varphi)\langle S = 1, m_s = 1|H'|S = 1, m_S = 1\rangle Y_{11}(\theta, \varphi) \\
&= \frac{3}{8\pi}\lambda \int \sin^2\theta(3\cos^2\theta - 1)\, 2\pi \sin\theta d\theta \\
&= \frac{3}{4}\lambda \int_0^\pi \sin^3(3\cos^2\theta - 1)\, d\theta \\
&= -\frac{2}{5}\lambda .
\end{aligned}$$

(c) Đối với trạng thái ${}^1P_1$, vì $S = 0$, $m_s = 0$ và như vậy $H' = 0$, ta có $\Delta E({}^1P_1) = 0$.

5063

Một nguyên tử hydro lúc đầu ở trạng thái cơ bản, đó là trạng thái $F = 0$ của cấu trúc siêu tinh tế. (F là tổng của spin proton I, spin electron s và mômen quỹ đạo L). Trạng thái $F = 0$ được tách từ trạng thái $F = 1$ với hiệu năng lượng ΔE.

Một từ trường yếu phụ thuộc thời gian được đưa vào. Nó được hướng dọc theo trục z và có dạng $B_z = 0$, $t < 0$, $B_z = B_0 \exp(-\gamma t)$, $t > 0$. Ở đây B_0 và γ là các hằng số.

(a) Hãy tính xác suất để trong một tương lai xa khi trường bị tắt, nguyên tử sẽ nằm ở trạng thái $F = 1$ của cấu trúc siêu tinh tế.

(b) Giải thích tại sao, trong lời giải của bài toán, bạn có thể bỏ qua tương tác của proton với từ trường.

(Princeton)

Lời giải:

(a) Khi xét cấu trúc siêu tinh tế của nguyên tử hydro, ta viết Hamiltonian của hệ là

$$H = H_0 + f(r)\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \boldsymbol{\sigma}_e ,$$

trong đó H_0 là Hamiltonian được sử dụng để xét cấu trúc tinh tế của nguyên tử hydro, $f(r)\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \boldsymbol{\sigma}_e$ là bổ chính năng lượng sinh ra do cấu trúc siêu tinh tế, $\boldsymbol{\sigma}_p$ và $\boldsymbol{\sigma}_e$ là ma trận spin Pauli tương ứng cho proton và electron.

Khi nguyên tử ở trạng thái cơ bản tuyệt đối với $L = 0$, $j = s = \frac{1}{2}$, những trạng thái cấu trúc siêu tinh tế lần lượt với $F = 0$ và $F = 1$ sẽ lần lượt tương ứng với trạng thái có spin của proton và electron song song và đối song.

Hàm sóng ban đầu của hệ là

$$\psi(\mathbf{r}, F) = R_{10} Y_{00}(\theta, \varphi)\Theta_{00} .$$

Gọi α, β biểu diễn các spinor $\binom{1}{0}$, $\binom{0}{1}$, ta có hàm sóng spin

$$\Theta_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\alpha_p\beta_e + \alpha_e\beta_p) ,$$

mà chính nó làm cho ψ trở nên phản đối xứng. Khi $t > 0$, một từ trường yếu $B_z = B_0 e^{-\gamma t}$ tác động lên hệ và Hamiltonian trở thành

$$\hat{H} = H_0 + f(r)\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \boldsymbol{\sigma}_e + \frac{\hbar e B_z}{2\mu c}\hat{\sigma}_{ez},$$

nếu ta bỏ qua tương tác giữa từ trường và proton.

Giả sử hàm sóng của hệ ở thời điểm $t > 0$ là

$$\psi(\mathbf{r}, F, t) = R_{10}(r)Y_{00}[C_1(t)\Theta_{00} + C_2(t)\Theta_{11} + C_3(t)\Theta_{10} + C_4(t)\Theta_{1,-1}],$$

trong đó

$$\Theta_{11} = \alpha_p\alpha_e,$$
$$\Theta_{1,-1} = \beta_p\beta_e,$$
$$\Theta_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_p\beta_e + \alpha_e\beta_p).$$

Khi đó, xác suất để hệ ở trạng thái cấu trúc siêu tinh tế $F = 1$ vào thời điểm t là

$$A(t) = 1 - |C_1(t)|^2,$$

và điều kiện ban đầu là

$$C_1(0) = 1, C_2(0) = C_3(0) = C_4(0) = 0.$$

Bởi vì

$$\sigma_x\alpha = \beta, \quad \sigma_x\beta = \alpha,$$
$$\sigma_y\alpha = i\beta, \quad \sigma_y\beta = -i\alpha,$$
$$\sigma_z\alpha = \alpha, \quad \sigma_z\beta = -\beta,$$

ta có

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \boldsymbol{\sigma}_e\Theta_{00} &= (\sigma_{px}\sigma_{ex} + \sigma_{py}\sigma_{ey} + \sigma_{pz}\sigma_{ez})\frac{1}{\sqrt{2}}(-\alpha_p\beta_e + \alpha_e\beta_p) \\ &= -3\Theta_{00},\end{aligned}$$

và tương tự

$$\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \sigma_e\Theta_{1m} = \Theta_{1m}.$$

Cuối cùng, từ phương trình Schrödinger $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi$ ta thu được

$$
\begin{aligned}
& i\hbar R_{10}(r)Y_{00}\left(\frac{dC_1}{dt}\Theta_{00} + \frac{dC_2}{dt}\Theta_{11} + \frac{dC_3}{dt}\Theta_{10} + \frac{dC_4}{dt}\Theta_{1,-1}\right) \\
&\quad = R_{10}(r)Y_{00}\{[E_{10} - 3f(a_0)]C_1(t)\Theta_{00} \\
&\qquad + [E_{10} + f(a_0)]\,[C_2(t)\Theta_{11} + C_3(t)\Theta_{10} + C_4(t)\Theta_{1,-1}]\} \\
&\qquad + R_{10}(r)Y_{00}\mu_0 B_z[C_3(t)\Theta_{00} + C_2(t)\Theta_{11} \\
&\qquad + C_1(t)\Theta_{10} - C_4(t)\Theta_{1,-1}] .
\end{aligned}
$$

Bằng cách so sánh hệ số của Θ_{00} và của Θ_{10} ở hai vế của phương trình, ta có

$$
\begin{cases}
i\hbar\dfrac{d}{dt}C_1(t) = [E_{10} - 3f(a_0)]\,C_1(t) + C_3(t)\mu_0 B_0 e^{-\gamma t} , \\
i\hbar\dfrac{d}{dt}C_3(t) = [E_{10} + f(a_0)]\,C_3(t) + C_1(t)\mu_0 B_0 e^{-\gamma t} .
\end{cases}
$$

Vì năng lượng $f(a_0)$ của cấu trúc siêu tinh tế là nhỏ hơn nhiều so với E_{10}, là năng lượng của cấu trúc tinh tế, nên nó có thể bỏ qua khi tính $C_1(t)$. Khi đó phương trình trên đây trở thành

$$C_1(t) = \frac{1}{2}e^{-i\frac{E_{10}}{\hbar}t}\{e^{\frac{i\mu_0 B_0}{\gamma\hbar}(1-e^{-\gamma t})} + e^{-\frac{i\mu_0 B_0}{\gamma\hbar}(1-e^{-\gamma t})}\} .$$

Khi $t \to \infty$,

$$|C_1(t)|^2 \to \cos^2\left(\frac{\mu_0 B_0}{\gamma\hbar}\right) .$$

Do đó

$$A(t)|_{t\to\infty} = 1 - \cos^2\left(\frac{\mu_0 B_0}{\gamma\hbar}\right) = \sin^2\left(\frac{\mu_0 B_0}{\gamma\hbar}\right) ,$$

và nó là xác suất để nguyên tử hydro nằm ở trạng thái $F = 1$.

(b) Tương tác giữa mômen từ của proton và từ trường có thể bỏ qua bởi vì mômen từ của proton chỉ bằng 1/1840 mômen từ của electron.

5064

Một hạt phi tương đối tính không có spin trong trường xuyên tâm được chuẩn bị trong trạng thái s, mà trạng thái này cùng với các trạng thái p ($m_\ell = 0, \pm 1$) làm thành những trạng thái của một mức năng lượng suy biến. Tại thời

điểm $t = 0$ người ta đặt một điện trường $\mathbf{E} = E_0 \sin\omega t \hat{\mathbf{z}}$. Bỏ qua khả năng chuyển dời đến những trạng thái mới, khác với những trạng thái đã nói ở trên, nhưng không đưa thêm những giả thiết gần đúng nào khác, hãy tìm xác suất chiếm đối với mỗi trong số bốn trạng thái ở thời điểm t, theo các yếu tố khác không của ma trận $\hat{z}$.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Chọn bốn trạng thái đã cho là các vectơ trạng thái và mức năng lượng chính là năng lượng suy biến $E = 0$. Hamiltonian của hệ là

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \ \hat{H}' = -g\mathbf{E}\cdot\mathbf{r} = -gE_0 z \sin\omega t \, .$$

Để tìm ma trận của năng lượng nhiễu loạn, cần nhận xét rằng, chỉ có các yếu tố $\langle l+1, m_l|z|l, m_l\rangle$ là khác không. Như vậy, ta có

$$\hat{H}' = \begin{array}{c} \langle 00| \\ \langle 10| \\ \langle 1,-1| \\ \langle 11| \end{array} \overset{\begin{array}{cccc} |00\rangle & |10\rangle & |1,-1\rangle & |11\rangle \end{array}}{\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} (-gE_0\langle 00|z|10\rangle \sin\omega t) \, .$$

Giả sử hàm sóng là $\psi = (x_1, x_2, x_3, x_4)$, và ban đầu $\psi(t=0) = (1, 0, 0, 0)$, trong đó x_1, x_2, x_3, x_4 là bốn vectơ trạng thái. Phương trình Schrödinger $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi$ có thể viết là

$$i\hbar \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = -\lambda \sin\omega t \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = 0, \quad (2)$$

trong đó $\lambda = gE_0\langle 00|z|10\rangle$ là một số thực.

Phương trình (2) và điều kiện ban đầu cho

$$\begin{pmatrix} x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}_{t=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

mà điều đó nghĩa là xác suất để hệ chiếm trạng thái $m_l = \pm 1$ của mức p là bằng không. Để giải phương trình (1), trước hết ta chéo hóa ma trận và giải phương trình trường kì

$$\begin{vmatrix} \lambda & 1 \\ 1 & \lambda \end{vmatrix} = 0 ,$$

và nó cho nghiệm $\lambda = \pm 1$. Do đó, hai thành phần đầu của ψ được biến đổi thành

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} x_1 + x_2 \\ x_1 - x_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} .$$

Khi đó, phương trình (1) trở thành

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -\lambda \sin \omega t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} ,$$

với điều kiện ban đầu

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_{t=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

Giải phương trình ta tìm được

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \exp\left\{ \frac{i\lambda}{\hbar\omega} (1 - \cos \omega t) \right\} \\ \exp\left\{ -\frac{i\lambda}{\hbar\omega} (1 - \cos \omega t) \right\} \end{pmatrix} .$$

Quay về các vectơ trạng thái ban đầu,

$$\psi = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a + b \\ a - b \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \cos \left[\frac{\lambda}{\hbar\omega} (1 - \cos \omega t) \right] \\ i \sin \left[\frac{\lambda}{\hbar\omega} (1 - \cos \omega t) \right] \end{pmatrix} .$$

Như vậy, xác suất chiếm chỗ đối với mỗi một trong số bốn trạng thái ở thời

điểm t là

$$P_s(t) = |x_1|^2 = \cos^2\left[\frac{gE_0\langle 00|z|10\rangle}{\hbar\omega}(1-\cos\omega t)\right]$$

$$P_{p(m_l=0)}(t) = |x_2|^2 = \sin^2\left[\frac{gE_0\langle 00|z|10\rangle}{\hbar\omega}(1-\cos\omega t)\right]$$

$$P_{p(m_l=\pm 1)}(t) = 0\,,$$

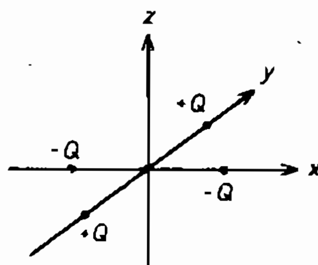
trong đó $\langle 00|z|10\rangle$ sẽ được tính bằng cách sử dụng hàm sóng $R_{nl}Y_{lm}(\theta,\varphi)$ cho một hạt trong trường xuyên tâm và nó là một số thực.

5065

Ion của một nguyên tử nào đó có $L = 1$ và $S = 0$ khi nó tự do trong không gian. Ion được cấy trong một chất rắn tinh thể (tại $x = y = z = 0$) và thấy nó được bao quanh bởi 4 hạt tích điện, như được vẽ trong Hình 5.19. Bằng cách áp dụng định lý Wigner - Eckart có thể chứng tỏ rằng (**đừng cố làm**), nhiễu loạn hiệu dụng đối với Hamiltonian gây nên bởi điện tích bao quanh có thể viết dưới dạng

$$H_1 = \frac{\alpha}{\hbar^2}(L_x^2 - L_y^2)\,,$$

trong đó L_x và L_y là thành phần x và y của mômen góc quỹ đạo, và α là một hằng số. Thêm vào nữa, một từ trường được đặt dọc theo trục z và gây thêm một nhiễu loạn $H_z = \frac{\beta B}{\hbar} L_z$, trong đó L_z là thành phần z của toán tử mômen quỹ đạo và β là một hằng số.



Hình 5.19

(a) Hãy diễn tả Hamiltonian nhiễu loạn $H' = H_1 + H_2$ theo L_+ và L_-, các toán tử nâng, hạ của mômen quỹ đạo.

(b) Hãy tìm ma trận của Hamiltonian nhiễu loạn trong hệ cơ sở, gồm ba trạng thái $|1,0\rangle$, $|1,1\rangle$ và $|1,-1\rangle$.

(c) Hãy tìm các mức năng lượng của ion như là một hàm của B. Vẽ cẩn thận kết quả bạn vừa thu được.

(d) Khi $B = 0$, hàm riêng mô tả ion là những hàm nào?

(*MIT*)

Lời giải:

(a) Từ định nghĩa $L_\pm = L_x \pm iL_y$, suy ra

$$[L_+, L_-] = -2i[L_x, L_y] = 2\hbar L_z \,,$$

$$L_x^2 - L_y^2 = \frac{1}{4}(L_+ + L_-)^2 + \frac{1}{4}(L_+ - L_-)^2 = \frac{1}{2}(L_+^2 + L_-^2)\,.$$

Như vậy, Hamiltonian nhiễu loạn là

$$\begin{aligned} H' &= \frac{\alpha}{\hbar^2}(L_x^2 - L_y^2) + \frac{\beta B}{\hbar} L_z \\ &= \frac{\alpha}{2\hbar^2}(L_+^2 + L_-^2) + \frac{\beta B}{2\hbar^2}(L_+L_- - L_-L_+)\,. \end{aligned}$$

(b) Sử dụng công thức

$$L_\pm |L, M_L\rangle = \hbar\sqrt{L(L+1) - M_L(M_L \pm 1)}\,|L, M_L \pm 1\rangle\,,$$

ta tìm được những yếu tố khác không sau đây

$$\begin{aligned} L_-^2|1,1\rangle &= \sqrt{2}\hbar L_-|1,0\rangle \\ &= 2\hbar^2|1,-1\rangle, \\ L_+^2|1,-1\rangle &= 2\hbar^2|1,1\rangle\,, \\ L_+L_-|1,1\rangle &= 2\hbar^2|1,1\rangle\,, \\ L_+L_-|1,0\rangle &= 2\hbar^2|1,0\rangle\,, \\ L_-L_+|1,0\rangle &= 2\hbar^2|1,0\rangle\,, \\ L_-L_+|1,-1\rangle &= 2\hbar^2|1,-1\rangle \end{aligned}$$

và như vậy ma trận $(\langle L', M'_L|H'|L, M_L\rangle)$ sẽ là

$$H' = \begin{matrix} \\ \langle 1,1| \\ \langle 1,0| \\ \langle 1,-1| \end{matrix} \begin{matrix} |1,1\rangle & |1,0\rangle & |1,-1\rangle \\ \left(\begin{matrix} \beta B \\ 0 \\ \alpha \end{matrix}\right. & \begin{matrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{matrix} & \left.\begin{matrix} \alpha \\ 0 \\ -\beta B \end{matrix}\right) \end{matrix} .$$

(c) Năng lượng nhiễu loạn E được xác định bằng phương trình ma trận

$$\begin{pmatrix} \beta B - E & 0 & \alpha \\ 0 & -E & 0 \\ \alpha & 0 & -\beta B - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = 0 ,$$

mà phương trình trường kì của nó là

$$\begin{vmatrix} \beta B - E & 0 & \alpha \\ 0 & -E & 0 \\ \alpha & 0 & -\beta B - E \end{vmatrix} = 0$$

sẽ cho bổ chính

$$E_1 = -\sqrt{(\beta B)^2 + \alpha^2} ,$$

$$E_2 = 0 ,$$

$$E_3 = \sqrt{(\beta B)^2 + \alpha^2} .$$

Các mức năng lượng nhiễu loạn được mô tả trong Hình 5.20 như là hàm đối với B, trong đó, đường đứt nét là đường tiệm cận.

(d) Nếu $B = 0$, các mức năng lượng là

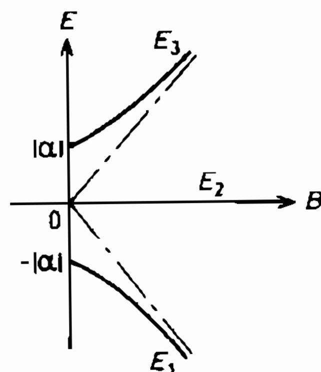
$$E_1 = -\alpha, \quad E_2 = 0, \quad E_3 = \alpha ,$$

và các trạng thái riêng tương ứng được cho là

$$a = -c \neq 0, \ b = 0 ;$$

$$a = c = 0, \ b \neq 0 ;$$

$$a = c \neq 0, \ b = 0 .$$



Hình 5.20

Như vậy, trạng thái riêng năng lượng tương ứng là

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}_{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}_{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}_{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Diễn tả theo các vectơ trạng thái $|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle$, hàm sóng sẽ là

$$|E_1 = -\alpha\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|1,1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,-1\rangle,$$

$$|E_2 = 0\rangle = |1,0\rangle,$$

$$|E_3 = \alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,-1\rangle.$$

5066

Phần phụ thuộc vào spin của Hamiltonian hiệu dụng đối với positroni (trạng thái liên kết của electron và positron) trong từ trường B được viết là

$$H_{\text{spin}} = A\boldsymbol{\sigma}_e \cdot \boldsymbol{\sigma}_p + \mu_B B(\sigma_{ez} - \sigma_{pz}).$$

trong đó $\boldsymbol{\sigma}_e$ và $\boldsymbol{\sigma}_p$ là các ma trận spin Pauli cho electron và positron, còn μ_B là magneton Bohr.

(a) Khi từ trường bằng không, trạng thái đơn tuyến nằm thấp hơn 8×10^{-4} eV so với trạng thái tam tuyến. Giá trị của A là bao nhiêu?

(b) Minh họa bằng cách vẽ đồ thị mô tả sự phụ thuộc của năng lượng mỗi một trong bốn trạng thái spin vào từ trường B, bao gồm cả hai trường hợp trường mạnh và yếu.

(c) Nếu nguyên tử positroni nằm trong trạng thái năng lượng thấp nhất của nó trong một từ trường mạnh và từ trường bị ngắt một cách tức thời, thì ở xác suất tìm thấy nguyên tử ở trạng thái đơn tuyến là bao nhiêu?

(d) Kết quả của câu (c) sẽ thay đổi thế nào nếu trường được ngắt một cách từ từ.

(Wlàconsin)

Lời giải:

(a) Khi $B = 0$, Hamiltonian hiệu dụng có giá trị trung bình

$$\langle H_{\text{spin}} \rangle = A \langle F' m'_F | \boldsymbol{\sigma}_e \cdot \boldsymbol{\sigma}_p | F m_F \rangle ,$$

trong đó $\mathbf{F} = \mathbf{s}_e + \mathbf{s}_p$.

Bởi vì

$$\boldsymbol{\sigma}_e \cdot \boldsymbol{\sigma}_p = \frac{2}{\hbar^2} (\mathbf{F}^2 - \mathbf{s}_e^2 - \mathbf{s}_p^2) ,$$

$$E = \langle H_{\text{spin}} \rangle = 2A[F(F+1) - s_e(s_e+1) - s_p(s_p+1)] \cdot \delta_{F'F} \cdot \delta_{m'_F m_F} .$$

Đối với trạng thái tam tuyến, $F = 1$, nên

$$E_{F-1} = 2A \left(1 \cdot 2 - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{3} \right) = A.$$

Đối với trạng thái đơn tuyến, $F = 0$, nên $E_{F=0} = -3A$.

Do đó, $E_{F-1} - E_{F-0} = 4A = 8 \times 10^{-4}$ eV, sẽ cho $A = 2 \times 10^{-4}$ eV.

(b) Trước hết ta biến đổi từ biểu diễn gồm các vectơ của trạng thái liên kết sang các vectơ của trạng thái không liên kết

$$|F = 1, m_F = 1\rangle = \left| s_e = \frac{1}{2}, m_{se} = \frac{1}{2}, s_p = \frac{1}{2}, m_{sp} = \frac{1}{2} \right\rangle ,$$

$$|F=1,\ m_F=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left|s_e=\frac{1}{2},\ m_{se}=\frac{1}{2},\ s_p=\frac{1}{2},\right.\right.$$

$$\left.\left. m_{sp}=-\frac{1}{2}\right\rangle + \left|s_e=\frac{1}{2},\ m_{se}=-\frac{1}{2},\ s_p=\frac{1}{2},\ m_{sp}=\frac{1}{2}\right\rangle\right\},$$

$$|F=1,\ m_F=-1\rangle = \left|s_e=\frac{1}{2},\ m_{se}=-\frac{1}{2},\ s_p=\frac{1}{2},\ m_{sp}=-\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$|F=0,\ m_F=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left|s_e=\frac{1}{2},\ m_{se}=\frac{1}{2},\ s_p=\frac{1}{2},\right.\right.$$

$$\left.\left. m_{sp}=-\frac{1}{2}\right\rangle - \left|s_e=\frac{1}{2},\ m_{se}=-\frac{1}{2},\ s_p=\frac{1}{2},\ m_{sp}=\frac{1}{2}\right\rangle\right\}.$$

Khi đó, vì $\mu_B B(\sigma_{ez}-\sigma_{pz}) = \frac{2\mu_B B}{\hbar}(s_{ez}-s_{pz})$ và

$$\begin{aligned}(s_{ez}-s_{pz})|F=0,\ m_F=0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(s_{ez}-s_{pz})\left(\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right.\\ &\quad \left.-\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right)\\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right.\\ &\quad \left.-\left(-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right)\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right]\\ &= \hbar|F=1,\ m_F=0\rangle,\end{aligned}$$

$$(s_{ez}-s_{pz})|F=1,\ m_F=0\rangle = \hbar|F=0, m_F=0\rangle,$$

$$(s_{ez}-s_{pz})|F=1,\ m_F=1\rangle = (s_{ez}-s_{pz})|F=1, m_F=-1\rangle = 0,$$

và sử dụng kết quả của câu (a), ta có theo thứ tự $|1,1\rangle$, $|1,-1\rangle$, $|1,0\rangle$, $|0,0\rangle$,

$$H_{\text{spin}} = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A & 2\mu_B B \\ 0 & 0 & 2\mu_B B & -3A \end{pmatrix}.$$

Phương trình trường kì

$$\begin{vmatrix} A-E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A-E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A-E & 2\mu_B B \\ 0 & 0 & 2\mu_B B & -3A-E \end{vmatrix} = 0$$

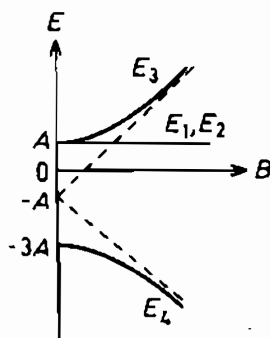
khi đó sẽ cho giá trị riêng của năng lượng spin

$$E_1 = E_2 = A\,,$$

$$E_3 = -A + 2\sqrt{A^2 + \mu_B^2 B^2}\,,$$

$$E_4 = -A - 2\sqrt{A^2 + \mu_B^2 B^2}\,.$$

Sự biến thiên của E theo B được diễn tả trên Hình 5.21. Nếu từ trường B là yếu, ta có thể coi số hạng $\mu_B B(\sigma_{ez} - \sigma_{pz})$ là nhiễu loạn. Bổ chính năng lượng là bằng không trong nhiễu loạn bậc nhất và nó tỉ lệ với B^2 trong gần đúng bậc hai. Khi từ trường B là rất mạnh, bổ chính năng lượng sẽ tuyến tính đối với B.



Hình 5.21

(c) Khi positroni được đặt vào một từ trường mạnh ($\mu_B B \gg A$), trạng thái năng lượng thấp nhất, nghĩa là, trạng thái riêng mà năng lượng xấp xỉ bằng $-A - 2\mu_B B$, sẽ là

$$\left| m_{se} = -\frac{1}{2},\ m_{sp} = \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |1,0\rangle - |0,0\rangle \right\}\ ,$$

trong đó, ta đã xét $A\boldsymbol{\sigma}_e \cdot \boldsymbol{\sigma}_p$ như số hạng nhiễu loạn. Nếu từ trường bị ngắt đột ngột, xác suất để nguyên tử nằm ở trạng thái $|F = 0, m_F = 0\rangle$ là

$$P = \left|\langle 0,0|\,\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\Big|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\langle 0,0|1,0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 0,0|0,0\rangle\right|^2 = \frac{1}{2}\,.$$

(d) Nếu từ trường được ngắt một cách từ từ, sẽ không xuất hiện sự chuyển dời và nguyên tử vẫn nằm ở trạng thái $|\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$, và năng lượng của hệ là $E = -A$.

5067

Positroni được tạo nên từ một electron và một positron liên kết bằng lực hút Coulomb.

(a) Bán kính trạng thái cơ bản bằng bao nhiêu? Năng lượng liên kết của trạng thái cơ bản bằng bao nhiêu?

(b) Các trạng thái tam tuyến và đơn tuyến bị tách nhờ tương tác spin - spin sao cho trạng thái đơn tuyến nằm cỡ 10^{-3} bên dưới trạng thái tam tuyến. Hãy giải thích các động thái của positroni trong một từ trường. Hãy vẽ sơ đồ các mức năng lượng để minh họa cho sự phụ thuộc vào từ trường.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Bán kính và năng lượng liên kết của trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro là

$$a_0 = \hbar^2/\mu e^2 \approx 0,53\,\text{Å}\,,$$
$$E_1 = \mu e^4/2\hbar^2 \approx 13,6\ \text{eV}\,,$$

trong đó $\mu = m_e m_p/(m_e + m_p)$, thế Coulomb $V(r) = -e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ đã được sử dụng.

Kết quả này có thể áp dụng cho bất kì nguyên tử tựa hydro nào với điện tích hạt nhân Ze bằng cách thay thế

$$V(r) \to V'(r) = -Ze^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|\,,$$
$$\mu \to \mu' = m_1 m_2/(m_1 + m_2)\,,$$

m_1, m_2 là khối lượng của hạt nhân và của electron quay quanh. Với positroni, $\mu' = \frac{m_e}{2}$, $Z = 1$, và do đó

$$a_0' = \hbar^2/\mu' e^2 = a_0\mu/\mu' = 2a_0 \approx 1\ \text{Å}\,,$$

$$E_1' = \mu' e^4/2\hbar^2 = \mu' E_1/\mu = \frac{1}{2}E_1 \approx 6.8\ \text{eV}\,.$$

(b) Chọn $|0, 0, S, S_z\rangle$ là trạng thái riêng và lấy Hamiltonian nhiễu loạn là

$$H' = A\mathbf{s}_e \cdot \mathbf{s}_p + \frac{eB}{mc}(s_{ez} - s_{pz})\,,$$

trong đó $A = \frac{10^{-3}\,\text{eV}}{\hbar^2}$. Sử dụng kết quả của **Bài tập 5066** ta có ma trận năng lượng nhiễu loạn

$$H'_{mn} = \begin{pmatrix} A\hbar^2/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A\hbar^2/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A\hbar^2/4 & -\hbar\dfrac{eB}{mc} \\ 0 & 0 & -\hbar\dfrac{eB}{mc} & -\dfrac{3}{4}A\hbar^2 \end{pmatrix} \begin{matrix} (1,1) \\ (1,-1) \\ (1,0) \\ (0,0) \end{matrix}\,,$$
$$\qquad\qquad (1,1) \qquad (1,-1) \qquad (1,0) \qquad (0,0)$$

từ đó ta tìm được năng lượng nhiễu loạn

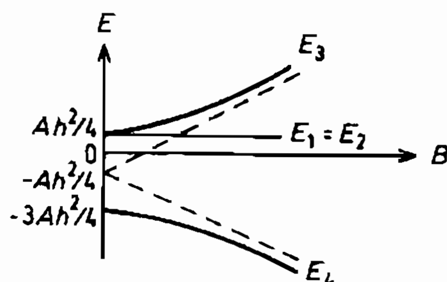
$$E_1 = E_2 = A\hbar^2/4\,,$$

$$E_3 = -A\hbar^2/4 + \sqrt{\left(\frac{A\hbar^2}{2}\right)^2 + \hbar^2\left(\frac{eB}{mc}\right)^2}\,,$$

$$E_4 = -A\hbar^2/4 - \sqrt{\left(\frac{A\hbar^2}{2}\right)^2 + \hbar^2\left(\frac{eB}{mc}\right)^2}\,.$$

Sự phụ thuộc của mức năng lượng vào B được vẽ trong Hình 5.22.

Kết quả chỉ ra rằng, mức năng lượng của cấu trúc siêu tinh tế là sự tách mức thêm khi có mặt một từ trường yếu, nhưng ngược lại, cấu trúc siêu tinh tế sẽ mất đi khi có mặt của từ trường mạnh. Những tình huống tới hạn đó đã được bàn đến trong **Bài tập 5059**.



Hình 5.22

5068

Hãy ước lượng độ từ thẩm của nguyên tử He ở trạng thái cơ bản. Nó là chất thuận từ hay nghịch từ?

(Chicago)

Lời giải:

Giả sử nguyên tử He được đặt trong từ trường ngoài đều $\mathbf{H} = H\hat{e}_z$ (H là một hằng số). Thế vectơ $\mathbf{A}$, được định nghĩa bằng $\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}$, và có thể lấy là $\mathbf{A} = \frac{1}{2} H(-y\hat{e}_x + x\hat{e}_y)$. Khi đó, Hamiltonian của hệ là

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P}_i - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \boldsymbol{\mu}_J \cdot \mathbf{H}.$$

Vì nguyên tử hêli ở trạng thái cơ bản, nên $\boldsymbol{\mu}_J = 0$. Do đó

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P}_i - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2.$$

trong đó m và e tương ứng là khối lượng và điện tích của electron.

Độ từ thẩm được tính bằng công thức $\chi = -4\pi \frac{\partial^2 E}{\partial H^2}|_{H=0}$. Đối với nguyên

tử hêli ở trạng thái cơ bản,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P}_i^2 - \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P}_i - \frac{e}{c} \mathbf{P}_i \cdot \mathbf{A} + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2 \right),$$

$$\frac{\partial^2 \hat{H}}{\partial H^2} = \sum_{i=1}^{2} \frac{e^2}{4mc^2} (x^2 + y^2) = \frac{e^2}{2mc^2} (x^2 + y^2).$$

và do đó

$$\chi = -4\pi \frac{\partial^2 E}{\partial H^2}\Big|_{H=0}$$

$$= -4\pi \frac{\partial^2}{\partial H^2} \langle He \text{ trạng thái cơ bản } |\hat{H}| He \text{ trạng thái cơ bản} \rangle$$

$$= -4\pi \frac{e^2}{2mc^2} \langle He \text{ trạng thái cơ bản} |x^2 + y^2| He \text{ trạng thái cơ bản} \rangle$$

$$= -4\pi \frac{e^2}{2mc^2} (\overline{x^2} + \overline{y^2}).$$

Vì $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$, ta có thể lấy

$$\overline{x^2} = \overline{y^2} \approx \frac{1}{3} r^2_{Heg.s.},$$

trong đó $r^2_{Heg.s.}$ là khoảng cách bình phương trung bình của mỗi electron từ hạt nhân He ở trạng thái cơ bản, và nó cho

$$\chi \approx -\frac{4\pi}{c^2} \frac{e^2 r^2_{Heg.s.}}{3m}$$

trong hệ đơn vị Gauss. Chú ý rằng $\chi < 0$, cho nên, nguyên tử hêli ở trạng thái cơ bản là nghịch từ.

5069

Một nguyên tử không có mômen từ vĩnh cửu được gọi là nghịch từ. Trong bài tập này, mục tiêu là tính mômen từ cảm ứng của nguyên tử hydro trong một từ trường yếu **B** khi bỏ qua spin của electron và của proton.

(a) Hãy viết Hamiltonian phi tương đối tính cho một hạt có khối lượng m và điện tích q bằng cách dùng kết hợp cả thế vectơ và thế vô hướng của trường điện từ.

(b) Biết rằng, thế vectơ **A** đối với một từ trường đều là $\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{B}$, hãy viết phương trình Schrödinger cho trạng thái dừng của nguyên tử hydro. Giả sử hạt nhân là vô cùng nặng và do đó chuyển động của khối tâm có thể bỏ qua.

(c) Coi số hạng do từ trường sinh ra như một nhiễu loạn, hãy tính sự chuyển dịch của năng lượng trạng thái cơ bản do sự có mặt của từ trường sinh ra.

(d) Hãy tính mômen nghịch từ cảm ứng đối với mỗi nguyên tử.

(MIT)

Lời giải:

(a) Một hạt có khối lượng m và điện tích q trong điện từ trường có thế $(\phi, \mathbf{A})$ và có Hamiltonian là

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + q\phi\,.$$

(b) Nếu chuyển động của proton có thể bỏ qua, phương trình Schrödinger cho nguyên tử hydro trong từ trường đều **B** là

$$\left[\frac{1}{2m_e}\left(\mathbf{p} + \frac{e}{2c}\mathbf{B} \times \mathbf{r}\right)^2 - \frac{e^2}{r}\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})\,,$$

trong đó $q = -e$ đối với một electron, hay

$$\left\{\frac{1}{2m_e}\left[\mathbf{p}^2 + \frac{e}{2c}\mathbf{p}\cdot\mathbf{B}\times\mathbf{r} + \frac{e}{2c}\mathbf{B}\times\mathbf{r}\cdot\mathbf{p} + \frac{e^2}{4c^2}(\mathbf{B}\times\mathbf{r})^2\right] - \frac{e^2}{r}\right\}\psi(\mathbf{r})$$
$$= E\psi(\mathbf{r})\,.$$

Vì

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{B}\times\mathbf{r} - \mathbf{B}\times\mathbf{r}\cdot\mathbf{p} = -i\hbar\nabla\cdot(\mathbf{B}\times\mathbf{r})$$
$$= -i\hbar(\nabla\times\mathbf{B})\cdot\mathbf{r} + i\hbar\mathbf{B}\cdot\nabla\times\mathbf{r} = 0$$

do **B** là đều và $\nabla \times \mathbf{r} = 0$, ta có

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{B}\times\mathbf{r} = \mathbf{B}\times\mathbf{r}\cdot\mathbf{p} = \mathbf{B}\cdot\mathbf{r}\times\mathbf{p} = \mathbf{B}\cdot\mathbf{L}.$$

Chọn chiều của từ trường đều **B** là trục z, ta có $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{e}}_z$, $\mathbf{B}\cdot\mathbf{L} = BL_z = i\hbar B\frac{\partial}{\partial\varphi}$ và

$$(\mathbf{B}\times\mathbf{r})^2 = (-By\hat{\mathbf{e}}_x + Bx\hat{\mathbf{e}}_y)^2 = B^2(x^2 + y^2) = B^2r^2\sin^2\theta$$

trong hệ tọa độ cầu.

Phương trình Schrödinger có thể viết thành

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} - \frac{ieB\hbar}{2m_e c}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{e^2B^2}{8m_e c^2}r^2\sin^2\theta\right)\psi(r,\theta,\varphi)$$
$$= E\psi(r,\theta,\varphi)$$

trong tọa độ cầu.

(c) Coi

$$H' = \frac{eB}{2m_e c}L_z + \frac{e^2B^2}{8m_e c^2}r^2\sin^2\theta$$

là một nhiễu loạn. Sự chuyển dịch năng lượng trong trạng thái cơ bản là

$$\Delta E = \langle 100|H'|100\rangle$$

với

$$|100\rangle = R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}},$$

trong đó $a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$. Như vậy

$$\Delta E = \left[2\pi\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^\infty r^2 dr\frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a}\right)^3 e^{-2r/a}r^2\sin^2\theta\right]\cdot\frac{e^2B^2}{8m_e c^2}$$
$$= \frac{1}{a^3}\int_0^\infty r^4 e^{-2r/a}dr\cdot\frac{e^2B^2}{3m_e c^2} = \frac{a^2e^2B^2}{4m_e c^2}.$$

Chú ý rằng đối với trạng thái cơ bản, $l = 0$, $m_l = 0$, và số hạng đầu tiên của H' không cho đóng góp gì vào ΔE.

(d) Độ dịch chuyển năng lượng trên đây bằng năng lượng của một lưỡng cực từ trong từ trường $\mathbf{B}$,

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B},$$

nếu mômen lưỡng cực là

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e^2a^2}{4m_e c^2}\mathbf{B}.$$

Đại lượng này có thể coi như lưỡng cực từ cảm ứng bởi trường. Nguyên tử là nghịch từ cho nên $\boldsymbol{\mu}$ là ngược chiều với $\mathbf{B}$.

5070

Sự phân cực từ của một nguyên tử được định nghĩa bằng $\alpha_H = -$

$\frac{\partial^2 E(H)}{\partial H^2}|_{H=0}$, trong đó $E(H)$ là năng lượng của nguyên tử trong từ trường ngoài không đổi.

(a) Hãy ước lượng độ phân cực của trạng thái $F = 0$, tức là trạng thái cơ bản siêu tinh tế $1s$ của nguyên tử hydro.

(b) Hãy ước lượng độ phân cực từ của trạng thái cơ bản $1s^2$ của nguyên tử hêli.

(CUSPEA)

Lời giải:

(a) Nếu từ trường **H** là rất yếu, Hamiltonian nhiễu loạn là $\mathbf{H}' = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{H}$.

Lấy chiều của **H** làm trục z và coi spin của electron và proton tương ứng là S và I ta có

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{H} &= \hbar^{-1}(g_e\mu_B S_z + g_p\mu_p I_z)H \\ &= \hbar^{-1}\left[\frac{1}{2}(g_e\mu_B + g_p\mu_p)(S_z + I_z) + \frac{1}{2}(g_e\mu_B - g_p\mu_p)(S_z - I_z)\right] H\,.\end{aligned}$$

Bậc nhất nhiễu loạn sẽ không cho đóng góp gì vào α_H (xem **Bài tập 5066**) vì $\langle F = 0, m_F = 0|S_z \pm I_z|F = 0, m_F = 0\rangle = 0$. Khi đó, ta xét bổ chính năng lượng ở bậc hai nhiễu loạn đối với trạng thái cơ bản $F = 0$, $1s$

$$E^{(2)}(H) = \sum_{m=-1}^{1}\frac{|\langle F = 1| - \boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{H}|F = 0\rangle|^2}{E_{F=0} - E_{F=1}}$$

trong đó m là số lượng tử của hình chiếu lên trục z của **F**.

$$\begin{aligned}E^{(2)}(H) &= \sum_{m=-1}^{1}|\langle F = 1, m| - \boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{H}|F = 0,0\rangle|^2/(E_{F=0} - E_{F=1}) \\ &= H^2\hbar^{-2}\sum_{m=-1}^{1}|\langle F = 1, m|\frac{1}{2}(g_e\mu_B - g_p\mu_p)(S_z - I_z)|F = 0,0\rangle|^2 \\ &\quad /(E_{F=0} - E_{F=1})\,,\end{aligned}$$

bởi vì $(S_z + I_z)|00\rangle = 0$. Khi đó, vì $(S_z - I_z)|0,0\rangle = \hbar|1,0\rangle$, các yếu tố ma trận hầu như bằng không trừ khi $m = 0$. Như vậy

$$E^{(2)}(H) = |\langle F = 1, m = 0|\frac{1}{2}(g_e\mu_B - g_p\mu_p)(S_z - I_z)$$

$$|F = 0,0\rangle|^2 H^2 \hbar^{-2}/(E_{F=0} - E_{F=1}) .$$

Vì $\mu_p \ll \mu_B$, $g_e = 1$, và vạch quang phổ $F = 1 \to F = 0$ sẽ có tần số bằng 140 MHz, tương ứng với $E_{F=1} - E_{F=0} = 0,58 \times 10^{-6}$ eV,

$$\alpha(H) = \frac{\mu_B^2}{2(E_{F=1} - E_{F=0})} = (5,8 \times 10^{-9} \text{ eV/Gs})^2/(2 \times 5,8 \times 10^{-7} \text{ eV})$$
$$= 2,9 \times 10^{-11} \text{ eV/Gs}^2 .$$

(b) Xét nguyên tử hêli trong một từ trường đều **H**. Thế vectơ $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{H} \times \mathbf{r}$ và nó đóng góp $e^2A^2/2mc^2$ đối với mỗi electron vào Hamiltonian nhiễu loạn và điều đó sẽ làm nảy sinh sự phân cực từ $\alpha(H)$ (**Bài tập 5068**). Nếu nguyên tử hêli ở trạng thái $1s^2$, khi đó $\mathbf{L} = \mathbf{S} = \mathbf{J} = 0$. Chọn phương của **H** làm trục z, ta có

$$H' = 2 \cdot \frac{e^2A^2}{2mc^2} = \frac{e^2H^2}{4mc^2}(x^2 + y^2) ,$$

thừa số 2 được thêm vào để tính đến việc có hai electron trong nguyên tử hêli. Bổ chính năng lượng như vậy là

$$E(H') = \left\langle \psi_0 \left| \frac{e^2H^2}{4mc^2}(x^2 + y^2) \right| \psi_0 \right\rangle$$
$$= \frac{e^2H^2}{4mc^2}\overline{x^2 + y^2} = \frac{e^2H^2}{4mc^2} \cdot \frac{2}{3} r_0^2 ,$$

trong đó r_0 là bán kính căn quân phương của nguyên tử hêli ở trạng thái cơ bản, vì $r_0^2 = \overline{x^2} + \overline{y^2} + \overline{z^2}$ và $\overline{x^2} = \overline{y^2} = \overline{z^2}$. Do $r_0 = \frac{\hbar^2}{Zme^2} = \frac{a_0}{2}$, a_0 là bán kính Bohr của nguyên tử hydro, nên

$$\alpha(H) = -\frac{\partial^2 E}{\partial H^2}\bigg|_{H=0} = -\frac{e^2}{2mc^2} \cdot \frac{2}{3} \cdot \left(\frac{a_0}{2}\right)^2 = -\frac{1}{6}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2 \frac{2a_0}{e^2}$$
$$= -\frac{\mu_B^2}{6E_I} .$$

trong đó $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ là magneton Bohr, $E_I = \frac{e^2}{2a_0}$ là thế ion hóa của hydro. Như vậy

$$\alpha(H) = -\frac{(0,6 \times 10^{-8})^2}{6 \times 13,6} = -4,4 \times 10^{-19} \text{ eV/Gs}^2 .$$

5071

Một hạt khối lượng m chuyển động trong một hố thế dao động tử điều hòa ba chiều. Hamiltonian là

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\mathbf{r}^2 .$$

(a) Hãy tìm năng lượng và mômen quỹ đạo của trạng thái cơ bản và của ba trạng thái kích thích đầu tiên.

(b) Nếu có tám hạt đồng nhất spin 1/2 không tương tác với nhau cùng được giam trong thế điều hòa nói trên, hãy tìm năng lượng cho trạng thái cơ bản của hệ tám hạt đó.

(c) Giả sử các hạt đó có mômen từ là μ. Nếu một từ trường B được đặt thêm vào, hãy tìm năng lượng gần đúng cho trạng thái cơ bản của hệ tám hạt như một hàm của B. Hãy vẽ độ từ hóa $(-\frac{\partial E}{\partial B})$ cho trạng thái cơ bản như một hàm của B.

(*Columbia*)

Lời giải:

(a) Một dao động tử điều hòa ba chiều sẽ có các mức năng lượng

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega ,$$

trong đó $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$,

$$N = 2n_r + l,\ N = 0, 1, 2, \dots,\ n_r = 0, 1, 2, \dots,$$
$$l = N - 2n_r .$$

Đối với trạng thái cơ bản, $N = 0$ và năng lượng là $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$, mômen quỹ đạo là $l = 0$.

Đối với trạng thái kích thích đầu tiên, $N = 1$, $E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$, $L = \hbar$. Vì $l = 1$ mức năng lượng này tương ứng với ba trạng thái suy biến.

(b) Cho các hạt có spin 1/2, hai hạt sẽ chiếm một trạng thái. Cứ như vậy cho đến khi lấp đầy hoàn toàn. Trạng thái cơ bản chứa hai hạt và trạng thái kích thích đầu tiên sẽ chứa sáu hạt. Như vậy, năng lượng của trạng thái cơ bản của hệ tám hạt sẽ là $E_0 = 2 \times \frac{3}{2}\hbar\omega + 6 \times \frac{5}{2}\hbar\omega = 18\hbar\omega$.

(c) Hamiltonian của hệ là

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{8} \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} k r_i^2 \right) - \sum_{i=1}^{8} \boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{B} - \sum_{i=1}^{8} \frac{e}{2mc} \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{B}$$

$$+ \sum_{i=1}^{8} \frac{e^2}{2mc^2} A^2(\mathbf{r}_i) + \sum_{i=1}^{8} \frac{1}{2m^2c^2r_i^2} \frac{dV(r_i)}{dr_i} \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{s}_i ,$$

trong đó $V(r_i) = \frac{1}{2} k r_i^2$, $\mathbf{A}$ là thế vectơ $\frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$, nó sinh ra từ trường $\mathbf{B}$.

Vì hàm sóng của tám hạt chiếm chỗ của hai lớp, tất cả các lớp đều được lấp đầy và ta có $\mathbf{S} = 0$, $\mathbf{L} = 0$, $\mathbf{j} = 0$.

Hàm sóng của hệ là tích của các hàm sau đây (kể cả phần bán kính)

$$\begin{cases} Y_{00}(\mathbf{e}_1)Y_{00}(\mathbf{e}_2) \frac{1}{\sqrt{2}} \{\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)\} , \\ Y_{11}(\mathbf{e}_3)Y_{11}(\mathbf{e}_4) \frac{1}{\sqrt{2}} \{\alpha(3)\beta(4) - \alpha(4)\beta(3)\} , \\ Y_{10}(\mathbf{e}_5)Y_{10}(\mathbf{e}_6) \frac{1}{\sqrt{2}} \{\alpha(5)\beta(6) - \alpha(6)\beta(5)\} , \\ Y_{1-1}(\mathbf{e}_7)Y_{1-1}(\mathbf{e}_8) \frac{1}{\sqrt{2}} \{\alpha(7)\beta(8) - \alpha(8)\beta(7)\} , \end{cases}$$

trong đó $\mathbf{e}_i = \mathbf{r}_i/r_i$. Chú ý rằng phần không gian của các hàm sóng tổng quát đó đều là tích của hai hàm sóng con giống nhau. Như vậy, do hàm sóng không gian toàn phần là đối xứng, nên hàm sóng spin toàn phần là phản đối xứng. Bởi vì

$$\sigma_x \alpha = \beta, \qquad \sigma_y \alpha = i\beta, \qquad \sigma_z \alpha = \alpha ,$$

$$\sigma_x \beta = \alpha, \qquad \sigma_y \beta = -i\alpha, \qquad \sigma_z \beta = -\beta ,$$

ta có

$$\sigma_{1x} \frac{1}{\sqrt{2}} \{\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)\} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\beta(1)\beta(2) - \alpha(2)\alpha(1)\} ,$$

$$\sigma_{2x} \frac{1}{\sqrt{2}} \{\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)\} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \{\beta(1)\beta(2) - \alpha(2)\alpha(1)\} ,$$

$$\sigma_{1y} \frac{1}{\sqrt{2}} \{\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)\} = \frac{i}{\sqrt{2}} \{\beta(1)\beta(2) + \alpha(2)\alpha(1)\} ,$$

$$\sigma_{2y} \frac{1}{\sqrt{2}} \{\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)\} = -\frac{i}{\sqrt{2}} \{\beta(1)\beta(2) + \alpha(2)\alpha(1)\} ,$$

$$\sigma_{1z} \frac{1}{\sqrt{2}} \{\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)\} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)\} ,$$

$$\sigma_{2z}\frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)\}=-\frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha(1)\beta(2)+\alpha(2)\beta(1)\}.$$

Các tích vô hướng của chúng với bra $\frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)\}^{+}$ sẽ suy ra $\langle\sigma_{1x}\rangle$, $\langle\sigma_{2x}\rangle$, $\langle\sigma_{1y}\rangle$, $\langle\sigma_{2y}\rangle$, đồng thời $\langle\sigma_{1z}+\sigma_{2z}\rangle$ đều bằng không. Từ đó ta có

$$\begin{aligned}\langle\sigma_{1z}L_{1z}+\sigma_{2z}L_{2z}\rangle &= -i\hbar\left\langle\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\cdot\sigma_{1z}+\frac{\partial}{\partial\varphi_2}\cdot\sigma_{2z}\right\rangle \\ &= -i\hbar\left[\left\langle\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\right\rangle\langle\sigma_{1z}\rangle+\left\langle\frac{\partial}{\partial\varphi_2}\right\rangle\langle\sigma_{2z}\rangle\right] \\ &= -i\hbar\left\langle\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\rangle\langle\sigma_{1z}+\sigma_{2z}\rangle=0.\end{aligned}$$

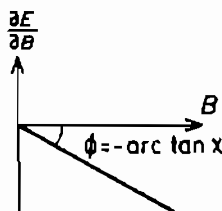
Như vậy, năng lượng của trạng thái cơ bản sẽ là

$$\begin{aligned}E &= 18\hbar\omega+\frac{e^2}{8mc^2}\sum_{i=1}^{8}\langle(\mathbf{B}\times\mathbf{r}_i)^2\rangle \\ &= 18\hbar\omega+e^2B^2/8mc^2\sum_{i=1}^{8}\langle r_i^2\sin^2\theta_i\rangle,\end{aligned}$$

và độ từ hóa là

$$-\frac{\partial E}{\partial B}=\frac{-e^2B}{4mc^2}\sum_{i=1}^{8}\langle r_i^2\sin^2\theta_i\rangle=\chi B,$$

nó sẽ cho $\chi=-\frac{e^2}{4mc^2}\sum_{i=1}^{8}\langle r_i^2\sin^2\theta_i\rangle$ như độ cảm nghịch từ. $\frac{\partial E}{\partial B}$ như là một hàm của B được cho trong Hình 5. 23.



Hình 5.23

5072

Giả sử có một electron ở trạng thái S của một nguyên tử hydro được đặt

vào một từ trường có hướng dọc theo trục z với cường độ H_z. Ở thời điểm $t = 0$ một từ trường dọc theo trục x được bật; cường độ của nó tăng dần đều từ không đến H_x sau thời gian $t = T$ ($H_x \ll H_z$) và nó trở nên không đổi sau khi $t = T$. Giả sử hạt nhân không có spin và rằng

$$\left(\frac{H_x}{H_z}\right)^2 \ll \frac{H_x}{H_z}.$$

Chỉ xét tương tác giữa spin electron với từ trường. Bỏ qua số hạng bậc $(\frac{H_x}{H_z})^2$ hoặc cao hơn. Nếu electron có spin theo trục z ở thời điểm $t = 0$, hãy tìm trạng thái của electron khi $t = T$. Hãy chỉ ra rằng, trạng thái đó là trạng thái riêng của Hamiltonian sinh ra do sự kết hợp của các từ trường $\mathbf{H} = (H_x, 0, H_z)$ miễn là T đủ dài. Hãy giải thích đủ dài ở đây có nghĩa là gì?

(Berkeley)

Lời giải:

Coi thế năng $H' = -\frac{t}{T}\boldsymbol{\mu}\cdot H_x\hat{\mathbf{e}}_x = -\frac{t(-e)}{Tmc}\mathbf{s}\cdot\hat{\mathbf{e}}_x H_x = \frac{teH_x}{Tmc}s_x$ là một nhiễu loạn. Trước khi H_x được bật lên, electron ở trong trạng thái S của nguyên tử hydro sẽ có hai trạng thái spin, $|\frac{1}{2}\rangle$ với năng lượng $E_+ = -\frac{(-e)}{mc}\cdot\frac{1}{2}\hbar H_z = \frac{e\hbar}{2mc}H_z$, và $|-\frac{1}{2}\rangle$ với năng lượng $E_- = -\frac{e\hbar}{2mc}H_z$.

Sử dụng lý thuyết nhiễu loạn phụ thuộc thời gian, lấy hàm sóng là

$$\psi(t) = e^{-iE_+t/\hbar}\left|\frac{1}{2}\right\rangle + a_- e^{-iE_-t/\hbar}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle,$$

trong đó a_- được cho bởi

$$\begin{aligned}
a_- &= \frac{1}{i\hbar}\int_0^T \left\langle -\frac{1}{2}\left|\hat{H}'\right|\frac{1}{2}\right\rangle e^{-i(E_+-E_-)t/\hbar}\,dt \\
&= \frac{1}{i\hbar}\int_0^T \frac{eH_x}{mc}\frac{t}{T}\left\langle -\frac{1}{2}\left|s_x\right|\frac{1}{2}\right\rangle \exp\left(-i\frac{eH_z}{mc}t\right)dt \\
&= \frac{eH_x}{2imcT}\int_0^T t\exp\left(-i\frac{eH_z}{mc}t\right)dt \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{H_x}{H_z}\right)\exp\left(-i\frac{eH_z}{mc}T\right) \\
&\quad - \frac{imcH_x}{2eTH_z^2}\left[\exp\left(-i\frac{eH_z}{mc}T\right) - 1\right],
\end{aligned}$$

ở đây ta đã dùng $s_x|\frac{1}{2}\rangle = \frac{\hbar}{2}|-\frac{1}{2}\rangle$.

Như vậy, trạng thái spin của electron ở thời điểm T là

$$\psi(T) = \exp\left(-i\frac{eH_z}{2mc}T\right)\left|\frac{1}{2}\right\rangle + \left\{\frac{1}{2}\left(\frac{H_x}{H_z}\right)\exp\left(-i\frac{eH_z}{mc}T\right) - \frac{imcH_x}{2eTH_z^2}\left[\exp\left(-i\frac{eH_z}{mc}T\right) - 1\right]\right\} \times \exp\left(i\frac{eH_z}{2mc}T\right)\left|-\frac{1}{2}\right\rangle .$$

Nếu thời gian T đủ dài sao cho $\frac{mc}{eT} \leq H_x$, ta có thể bỏ qua số hạng thứ hai của a_- và thu được

$$\psi(T) = \exp\left(-i\frac{eH_z}{2mc}T\right)\left(\left|\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{2}\frac{H_x}{H_z}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right) .$$

Hamiltonian sinh ra bởi từ trường kết hợp $\mathbf{H} = (H_x, 0, H_z)$ là

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} = \frac{eH_x}{mc}s_x + \frac{eH_z}{mc}s_z .$$

Gọi $\alpha = \frac{e}{mc}$ và xét $H\psi(T)$. Vì $s_x|\pm\frac{1}{2}\rangle = \frac{\hbar}{2}|\mp\frac{1}{2}\rangle$, $s_z|\pm\frac{1}{2}\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\frac{1}{2}\rangle$ ta có khi $T \to \infty$,

$$\begin{aligned}
\hat{H}\psi(T) &= \alpha\exp\left(-\frac{i\alpha H_z T}{2}\right)(H_x s_x + H_z s_z)\left(\left|\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{2}\frac{H_x}{H_z}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right) \\
&= \frac{\alpha\hbar}{2}\exp\left(-\frac{i\alpha H_z T}{2}\right)\left(H_x\left|-\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{2}\frac{H_x^2}{H_z}\left|\frac{1}{2}\right\rangle \right.\\
&\quad \left. + H_z\left|\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{2}H_x\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right) \\
&= \frac{\alpha\hbar H_z}{2}\exp\left(\frac{-i\alpha H_z T}{2}\right)\left\{\left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{H_x}{H_z}\right)^2\right]\left|\frac{1}{2}\right\rangle \right.\\
&\quad \left. + \frac{1}{2}\frac{H_x}{H_z}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right\} \\
&\approx \frac{\alpha\hbar H_z}{2}\exp\left(-\frac{i\alpha H_z T}{2}\right)\left(\left|\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{2}\frac{H_x}{H_z}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right) = \frac{e\hbar H_z}{2mc}\psi(T).
\end{aligned}$$

Kết quả chỉ ra rằng, khi T đủ lớn $\psi(T)$ là một trạng thái riêng của Hamiltonian sinh ra do từ trường kết hợp với giá trị riêng là $\frac{e\hbar H_z}{2mc}$.

5073

Một electron ở trong trạng thái riêng $n = 1$ của một hố thế vuông góc một chiều có tường cao vô hạn trải rộng từ $x = -a/2$ đến $x = a/2$. Ở thời điểm $t = 0$ một điện trường đều E được bật lên dọc theo trục x. Điện trường này tồn tại trong một khoảng thời gian τ và sau đó được tắt đi. Sử dụng lý thuyết nhiễu loạn phụ thuộc thời gian hãy tính các xác suất P_2 và P_3 để electron chuyển sang các trạng thái riêng tương ứng $n = 2$ và $n = 3$ ở thời điểm $t > \tau$. Giả sử τ rất ngắn theo nghĩa là $\tau \ll \frac{\hbar}{E_1 - E_2}$, trong đó E_n là năng lượng của trạng thái n. Hãy nêu rõ yêu cầu đối với tham số của bài toán để có thể áp dụng được lý thuyết nhiễu loạn phụ thuộc thời gian.

(Columbia)

Lời giải:

Electron ở trạng thái riêng $n = 1$ của hố thế

$$V = \begin{cases} 0 & |x| \leq a/2\,, \\ \infty & \text{trường hợp còn lại} \end{cases}$$

sẽ có hàm sóng và năng lượng tương ứng

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left[\frac{\pi n}{a}\left(\frac{a}{2} + x\right)\right],$$

$$E_n = \hbar^2\pi^2 n^2/2ma^2, \quad n = 1, 2, \ldots .$$

Điện trường đều $E\hat{e}_x$ có thế $\phi = -\int E dx = -Ex$. Thế năng của electron (điện tích $-e$) do E gây ra là $H' = eEx$ được coi như nhiễu loạn. Ta có

$$\begin{aligned} H'_{n_2 n_1} &= \langle n_2 | H' | n_1 \rangle \\ &= \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sin\left[\frac{n_1 \pi}{a}\left(x + \frac{a}{2}\right)\right] \sin\left[\frac{n_2 \pi}{a}\left(x + \frac{a}{2}\right)\right] eEx dx \\ &= \frac{eE}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \left\{ \cos\left[\frac{(n_1 - n_2)}{a}\pi\left(x + \frac{a}{2}\right)\right] \right. \\ &\quad \left. - \cos\left[\frac{(n_1 + n_2)}{a}\pi\left(x + \frac{a}{2}\right)\right] \right\} x dx \end{aligned}$$

$$= \frac{eE}{a}\left\{\frac{a^2}{(n_1-n_2)^2\pi^2}\left[(-1)^{n_1-n_2}-1\right] - \frac{a^2}{(n_1+n_2)^2\pi^2}\left[(-1)^{n_1+n_2}-1\right]\right\}$$

$$= \frac{4eEa}{\pi^2}\frac{n_1 n_2}{(n_1^2-n_2^2)^2}\left[(-1)^{n_1+n_2}-1\right],$$

$$\omega_{n_2 n_1} = \frac{1}{\hbar}(E_{n_2}-E_{n_1}) = \frac{\hbar\pi^2}{2ma^2}(n_2^2-n_1^2),$$

$$C_{k'k}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^\tau H'_{k'k}\, e^{i\omega_{k'k}t}dt = \frac{1}{\hbar}H'_{k'k}\,(1-e^{i\omega_{k'k}\tau})\,\frac{1}{\omega_{k'k}}.$$

Để có sự chuyển dời $1 \to 2$,

$$H'_{21} = \langle 2|H'|1\rangle = -\frac{16eEa}{9\pi^2}, \quad \omega_{21} = 3\hbar\pi^2/2ma^2,$$

và do đó xác suất tìm thấy electron ở trạng thái $n = 2$ ở $t > \tau$ là

$$P_2 = |C_{21}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2\omega_{21}^2}H'^2_{21}\,(1-e^{i\omega_{21}\tau})\,(1-e^{-i\omega_{21}\tau})$$

$$= \left(\frac{16a^2}{9\pi^2}\right)^3\left[\frac{eEm}{\hbar^2\pi}\sin\left(\frac{3\hbar\pi^2}{4ma^2}\tau\right)\right]^2 \approx \left(\frac{16}{9\pi^2}\frac{eEa}{\hbar}\tau\right)^2$$

với $\tau \ll \frac{\hbar}{E_1-E_2}$.

Để có chuyển dời $1 \to 3$,

$$H'_{31} = \langle 3|H'|1\rangle = 0.$$

và do đó

$$P_3 = |\langle C_{31}(t)|^2 = 0.$$

Để áp dụng được lý thuyết nhiễu loạn phụ thuộc thời gian đòi hỏi thời gian τ cần thiết để nhiễu loạn tác dụng là rất nhỏ. Chính thế năng nhiễu loạn cũng phải là rất nhỏ.

5074

Đối với một hạt khối lượng m trong hộp thế một chiều có chiều rộng l,

hàm sóng riêng và năng lượng là

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi x}{l}, \quad 0 \le x \le l,$$

$$E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{l}\right)^2, \quad n = \pm 1, \pm 2, \ldots .$$

Giả sử hạt lúc đầu ở trạng thái $|n\rangle$ và chiều rộng của hộp tăng dần đến độ lớn $2l$ ($0 \le x \le 2l$) sau một thời gian $t \ll h/E_n$. Sau đấy, xác suất để hạt nằm ở trạng thái riêng với năng lượng E_n là bao nhiêu?

(*MIT*)

Lời giải:

Trước hết ta xét quá trình trong đó chiều rộng của hộp tăng dần từ l đến $2l$. Vì $t \ll \frac{h}{E_n}$, nên sẽ rất có lý khi ta giả thiết rằng trạng thái của hạt không thể phản ứng kịp với những thay đổi diễn ra trong thời gian ngắn đến như thế. Vì vậy, hàm sóng của hạt sau khi sự thay đổi kết thúc, sẽ là

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi x}{l}, & 0 \le x \le l, \\ 0, & l \le x \le 2l. \end{cases}$$

Mặt khác, trạng thái riêng và giá trị riêng của cùng một hạt trong hộp thế một chiều rộng $2l$ là

$$\phi_{n'}(x) = \sqrt{\frac{1}{l}} \sin \frac{n'\pi x}{2l}, \quad (0 \le x \le 2l),$$

$$E_{n'} = \frac{1}{2m} \left(\frac{n'\pi\hbar}{2l}\right)^2, \quad (n' = \pm 1, \pm 2, \ldots).$$

Năng lượng E_n của hạt sẽ tương ứng với mức năng lượng $E_{n'}$ trong hộp rộng $2l$, trong đó $\frac{n}{l} = \frac{n'}{2l}$, nghĩa là, $n' = 2n$. Trạng thái riêng tương ứng khi đó là ϕ_{2n}. Như vậy, biên độ xác suất là

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{2n}(x)\psi(x)\, dx = \frac{\sqrt{2}}{l} \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi x}{l}\, dx = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

và xác suất tìm thấy hạt trong trạng thái riêng với năng lượng E_n là

$$P = |A|^2 = \frac{1}{2}.$$

5075

Một hạt ban đầu ở trạng thái cơ bản trong một hộp thế với vách cao vô hạn trải dài từ 0 đến L. Vách hộp ở $x = L$ bỗng nhiên chuyển ra vị trí $x = 2L$.

(a) Hãy tính xác suất để hạt được tìm thấy trong trạng thái cơ bản của hộp mở rộng.

(b) Tìm trạng thái mà hạt có khả năng chiếm giữ lâu nhất trong hộp mở rộng.

(c) Giả sử vách của hộp ban đầu $[0, L]$ bỗng nhiên biến mất và hạt đang ở trạng thái cơ bản. Hãy thiết lập hàm phân bố xác suất cho xung lượng của hạt mới được thả tự do.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Hàm sóng của hạt trước khi hộp mở rộng là

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}, & x \in [0, L], \\ 0 & \text{những trường hợp khác}. \end{cases}$$

Hàm sóng đối với trạng thái cơ bản của hệ sau khi hộp được mở rộng là

$$\phi_1(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{L}} \sin \frac{\pi x}{2L}, & x \in [0, 2L], \\ 0 & \text{những trường hợp khác}. \end{cases}$$

Xác suất cần tìm là

$$P_1 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1^*(x)\psi(x)dx \right|^2 = \left| \frac{\sqrt{2}}{L} \int_0^L \sin \frac{\pi x}{2L} \sin \frac{\pi x}{L} dx \right|^2 = \frac{32}{9\pi^2}.$$

(b) Xác suất để hạt được tìm thấy trong trạng thái kích thích đầu tiên của hộp mở rộng là

$$P_2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2^*(x)\psi(x)dx \right|^2 = \left| \frac{\sqrt{2}}{L} \int_0^L \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx \right|^2 = \frac{1}{2},$$

trong đó

$$\phi_2(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}, & x \in [0, 2L], \\ 0 & \text{những trường hợp khác}. \end{cases}$$

Để hạt được tìm thấy ở trạng thái $n \geq 3$, xác suất sẽ là

$$\begin{aligned} P_n &= \left| \frac{\sqrt{2}}{L} \int_0^L \sin \frac{n\pi x}{2L} \sin \frac{\pi x}{L} dx \right|^2 \\ &= \frac{2}{\pi^2} \left| \frac{\sin\left(\frac{n}{2} - 1\right)\pi}{(n-2)} - \frac{\sin\left(\frac{n}{2} + 1\right)\pi}{(n+2)} \right|^2 \\ &= \frac{32}{\pi^2} \frac{\sin^2\left(\frac{n}{2} + 1\right)\pi}{(n^2-4)^2} \\ &\leq \frac{32}{25\pi^2} < \frac{1}{2} . \end{aligned}$$

Như vậy, hạt có khả năng nhất là nằm trong trạng thái kích thích đầu tiên của hộp đã mở rộng.

(c) Hàm sóng của hạt được thả tự do với xung lượng p là $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$. Biên độ xác suất khi đó là

$$\begin{aligned} \Phi(p) &= \int_0^L \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar L}} [1 + e^{-ipL/\hbar}] \frac{L/\pi}{1 - (pL/\hbar\pi)^2} . \end{aligned}$$

Hàm phân bố xác suất cho xung lượng sẽ là

$$|\Phi(p)|^2 = \frac{2\pi\hbar^3 L}{(\hbar^2\pi^2 - p^2L^2)^2} \left(1 + \cos \frac{pL}{\hbar}\right) .$$

5076

Một hạt khối lượng M được đặt trong hố thế của dao động tử điều hòa một chiều $V_1 = \frac{1}{2} kx^2$.

(a) Ban đầu hạt nằm ở trạng thái cơ bản. Độ cứng bỗng nhiên tăng lên gấp đôi ($k \to 2k$) cho nên hàm thế mới là $V_2 = kx^2$. Năng lượng của hạt được đo khi đó. Xác suất tìm thấy hạt ở trạng thái cơ bản trong thế mới V_2 là bao nhiêu?

(b) Độ cứng bỗng nhiên tăng gấp đôi như trong câu (a), sao cho V_1 bỗng nhiên thành V_2, nhưng năng lượng của hạt trong hố thế mới V_2 không được đo. Thay vào đó, sau một khoảng thời gian T trôi qua kể từ lúc độ cứng tăng gấp đôi, độ cứng bỗng nhiên là trở lại giá trị ban đầu. Thời gian T phải bằng bao nhiêu để trạng thái cơ bản ban đầu trong V_1 được khôi phục với độ chắc chắn 100%.

(*CUSPEA*)

Lời giải:

(a) Hàm sóng của hệ trước khi k thay đổi là

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{M\omega_0}{\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2} M\omega_0 x^2/\hbar} .$$

Giả sử hạt cũng ở trạng thái cơ bản trong hố thế mới sau khi k thay đổi. Khi đó, hàm sóng mới sẽ là

$$\psi'(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{M\omega_1}{\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2} M\omega_1 x^2/\hbar} .$$

Yếu tố ma trận chuyển dời là

$$\begin{aligned}\langle\psi'|\psi\rangle &= \int \frac{1}{\pi} \left(\frac{M}{\hbar}\right)^{1/2} (\omega_0\omega_1)^{1/4} \exp\left[-\frac{1}{2} M \frac{(\omega_0+\omega_1)\, x^2}{\hbar}\right] dx \\ &= \frac{1}{\pi} \left(\frac{M}{\hbar}\right)^{1/2} (\omega_0\omega_1)^{1/4} \cdot \frac{\pi}{\sqrt{\frac{1}{2}\frac{M(\omega_0+\omega_1)}{\hbar}}} \\ &= \frac{(\omega_1\omega_0)^{1/4}}{\sqrt{\frac{1}{2}(\omega_0+\omega_1)}} .\end{aligned}$$

Khi thay đổi thành $2k$, ω_0 sẽ đổi thành $\omega_1 = \sqrt{2}\omega_0$, khi đó

$$\begin{aligned}|\langle\psi'|\psi\rangle|^2 &= \frac{(\omega_1\omega_0)^{1/2}}{\frac{1}{2}(\omega_0+\omega_1)} = \frac{(\sqrt{2}\omega_0^2)^{1/2}}{\frac{1}{2}(\sqrt{2}+1)\omega_0} \\ &= \frac{2^{1/4}}{\frac{1}{2}(\sqrt{2}+1)} = 2\cdot 2^{1/4}(\sqrt{2}-1) .\end{aligned}$$

Do đó, xác suất để hạt nằm trong trạng thái $\psi'(x)$ là

$$2^{\frac{5}{4}}(\sqrt{2}-1) .$$

(b) Trạng thái lượng tử không bị phá vỡ vì không tiến hành đo năng lượng. Ở thời điểm $t = 0$, $\psi(x,0) = \psi_0(x)$, $\psi_n(x)$ là trạng thái riêng của V_1. Ta khai triển $\psi(x,0)$ theo hệ trạng thái riêng của V_2:

$$\psi(x,0) = \langle\psi'_m|\psi_0\rangle|\psi'_m(x)\rangle .$$

Từ nay về sau, ta sẽ sử dụng quy tắc cộng theo chỉ số lặp lại. Khi đó

$$\psi(x,t) = e^{-iH_2t/\hbar}\psi(x,0) = \langle\psi'_m|\psi_0\rangle|\psi'_m(x)\rangle e^{-iE'_mt/\hbar} ,$$

trong đó H_2 là Hamiltonian tương ứng với V_2. Vì $\psi_0(x)$ có tính chẵn, sự bảo toàn tính chẵn lẻ sẽ cho

$$\langle\psi'_m(x)|\psi_0(x)\rangle = \begin{cases} 0, & m = 2n+1 , \\ \neq 0, & m = 2n , \end{cases}$$

và do đó

$$|\psi(x,\tau)\rangle = |\psi_{2m}(x)\rangle\langle\psi_{2m}|\psi_0\rangle e^{-iE_{2m}\tau/\hbar} .$$

Như vậy, $|\psi(x,\tau)\rangle = |\psi_0(x)\rangle$ chỉ có thể chờ đợi nếu $E_{2m}\tau/\hbar = 2N\pi + c$, trong đó N là số tự nhiên và c là một hằng số, với mọi m. Bởi vì

$$E_{2m} = \left(2m + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega'_1 ,$$

ta yêu cầu

$$\left(2m + \frac{1}{2}\right)\omega'_1\tau = 2N\pi + c .$$

Đặt

$$c = \frac{1}{2}\omega'_1\tau ,$$

ta yêu cầu

$$2m\omega'_1\tau = 2N\pi ,$$

hay

$$2\omega'_1\tau = 2N'\pi$$

nghĩa là,

$$\tau = \frac{\pi N'}{\omega'_1} ,$$

trong đó $N' = 0, 1, 2, \ldots$.

Như vậy, chỉ khi $\tau = N'\pi\sqrt{\frac{M}{2k}}$, trạng thái chuyển thành $\psi_0(x)$ với độ chắc chắn 100%.

5077

Một hạt chỉ chuyển động theo phương x bị hãm giữa hai vách ở $x = 0$ và $x = a$. Nếu hạt ở trạng thái cơ bản, năng lượng của nó là bao nhiêu? Giả sử vách hộp bỗng nhiên bị đẩy ra xa vô cùng, xác suất để hạt có xung lượng trong khoảng p và $p + dp$ là bao nhiêu? Năng lượng của hạt khi đó sẽ là bao nhiêu? Nếu nó không bằng năng lượng của trạng thái cơ bản, bạn sẽ nói gì về sự bảo toàn năng lượng?

(*Chicago*)

Lời giải:

Khi hạt bị hãm giữa $x = 0$ và $x = a$ ở trạng thái cơ bản, hàm sóng của nó là

$$\psi_0 = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}, & 0 \le x \le a, \\ 0 & \text{những trường hợp khác,} \end{cases}$$

và năng lượng của nó là

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

Khi vách hộp bỗng dưng bị đẩy ra vô hạn, hàm sóng của hạt không thể kịp thay đổi trong một thời gian ngắn như vậy và nó vẫn giữ nguyên dạng ban đầu. Tuy nhiên, Hamiltonian của hệ bây giờ bị thay đổi và do đó hàm sóng gốc không còn là trạng thái riêng của Hamiltonian mới. Hàm sóng gốc được chọn làm điều kiện ban đầu để giải phương trình Schrödinger cho hạt được giải phóng. Bó sóng của trạng thái cơ bản trong hố thế gốc sẽ khuếch tán đều đặn ra khắp không gian khi $t \to \infty$.

Biến đổi bó sóng gốc thành một hàm trong biểu diễn xung lượng ($p = \hbar k$), ta có

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cdot e^{ikx}\,dx$$
$$= -\sqrt{\frac{a\pi}{\hbar}}\,\frac{1+e^{ika}}{(ka)^2-\pi^2}.$$

Trong khoảng thời gian cực ngắn vách ngăn được tách ra, xác suất để xung lượng nằm trong khoảng $p \to p + dp$ được cho bởi

$$f(p)dp = \{|\psi(p)|^2 + |\psi(-p)|^2\}dp$$

$$= 8\,\frac{a\pi}{\hbar}\,\frac{\cos^2\left(\dfrac{ka}{2}\right)dp}{[(ka)^2 - \pi^2]^2} \quad \text{nếu} \quad p \neq 0\,;$$

$$f(0)dp = |\psi(0)|^2 dp = 4\,\frac{a}{\pi^3\hbar}\,dp \quad \text{nếu } p = 0\,.$$

Do Hamiltonian mới không phụ thuộc vào thời gian, ta có thể tính giá trị trung bình của năng lượng bằng cách sử dụng hàm sóng gốc

$$\bar{E} = \int_0^\infty \frac{p^2}{2m} f(p)dp = \int_0^\infty \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \cdot 8\,\frac{a\pi}{\hbar}\,\frac{\cos^2\left(\dfrac{ka}{2}\right)}{[(ka)^2 - \pi^2]^2}\,d(\hbar k)$$

$$= \frac{4\hbar^2}{ma^2}\int_0^\infty \frac{y^2\cos^2\left(\dfrac{\pi y}{2}\right)}{(y^2-1)^2}\,dy = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\,,$$

trong đó $y = \frac{ka}{\pi}$. Điều này nghĩa là năng lượng của hệ không thay đổi trong khoảng thời gian ngắn vách ngăn được tách ra và nó được chờ đợi bằng

$$\langle\psi_0|H_{\text{trước}}|\psi_0\rangle = \int_0^a \psi_0^*\,\frac{p}{2m}\,\psi_0 dx\,,$$

$$\langle\psi(t)|H_{\text{sau}}|\psi(t)\rangle = \langle\psi_0|\exp(iH_{\text{sau}}t/\hbar) \times H_{\text{sau}}\exp\left(\frac{-iH_{\text{sau}}t}{\hbar}\right)|\psi_0\rangle$$

$$= \langle\psi_0|H_{\text{sau}}|\psi_0\rangle = \int_0^a \psi_0^*\,\frac{p^2}{2m}\,\psi_0 dx$$

$$= \langle\psi_0|H_{\text{trước}}|\psi_0\rangle\,.$$

Nếu vách ngăn được tách ra một cách từ từ hoặc vách ngăn không cao vô hạn, sẽ có sự trao đổi năng lượng giữa hạt và vách ngăn. Kết quả là, năng lượng của hạt sẽ thay đổi trong quá trình tách vách ngăn.

5078

Một hạt nhân điện tích Z có nguyên tử số đột ngột trở thành $Z+1$ qua phóng xạ β như được minh họa trong Hình 5.24. Xác suất để một electron ở

lớp K trước phóng xạ vẫn còn ở lớp K sau khi phóng xạ β là bao nhiêu? Bỏ qua tương tác electron - electron.

(*CUSPEA*)

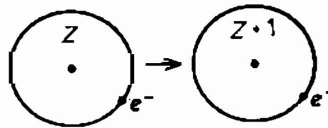
Lời giải:

Hàm sóng của một electron ở lớp K trong nguyên tử có điện tích hạt nhân Z là

$$\psi(r) = NZ^{3/2}e^{-rZ/a} .$$

Vì $\int_0^\infty r^2 dr N^2 e^{-2r/a} = 1$, xác suất để electron ở lớp K vẫn ở trên quỹ đạo ban đầu là

$$P = |\langle\psi_{Z+1}(r)|\psi_Z(r)\rangle|^2 = \frac{\left(1+\frac{1}{Z}\right)^3}{\left(1+\frac{1}{2Z}\right)^6} .$$



Hình 5.24

5079

Một nguyên tử triti (^3H) do phóng xạ tự phát trở thành ion hêli-3 ($^3He^+$) sau khi đã phát ra một hạt β. Việc phát ra electron diễn ra nhanh đến nỗi, quá trình đó có thể coi như một sự thay đổi tức thì trong điện tích của hạt nhân từ $Z = 1$ sang $Z = 2$. Hãy tính xác suất để ion He vẫn ở trạng thái cơ bản.

(*Berkeley*)

Lời giải:

Hàm sóng của trạng thái cơ bản của ion He là

$$\psi_{1s}^{He^+} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2}{a}\right)^{3/2}\exp\{-2r/a\} ,$$

trong đó a là bán kính Bohr. Gọi hàm sóng của ^3H be $\varphi(\mathbf{r})$.

Vì quá trình phân rã β diễn ra quá nhanh, cho nên, trong khoảng thời gian ^3H thành $^3He^+$ hàm sóng chưa có thời gian để thay đổi. Như vậy, xác suất để

$^3He^+$ ở trạng thái cơ bản là

$$P = \frac{|\langle \psi_{1s}^{He^+} | \varphi \rangle|^2}{|\langle \varphi | \varphi \rangle|^2} .$$

Ban đầu, ^3H nằm ở trạng thái cơ bản, cho nên

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} e^{-r/a} .$$

Như vậy,

$$P = \left| 4 \left(\frac{2}{a^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty r^2 \exp\left\{-\frac{3r}{a}\right\} dr \right|^2$$
$$= \frac{2^7}{3^6} \left| \int_0^\infty x^2 e^{-x} dx \right|^2 = \frac{2^9}{3^6} = 0.702 .$$

5080

Triti (tức là hydro với khối số 3, nghĩa là ^3H) là chất phóng xạ và phân rã thành hạt nhân hêli-3 (^3He) bằng cách phát ra một electron và một nơtrino. Giả sử electron ban đầu liên kết trong nguyên tử triti, vốn nằm ở trạng thái cơ bản vẫn tiếp tục gắn với hạt nhân ^3He được tạo nên từ phân rã để tạo thanh ion $^3He^+$.

(a) Hãy tính xác suất để ion $^3He^+$ được tìm thấy ở trạng thái $1s$.

(b) Xác suất để nó nằm trong trạng thái $2p$ là bao nhiêu?

(*MIT*)

Lời giải:

Bỏ qua sự sai khác nhỏ về khối lượng rút gọn giữa nguyên tử hydro và nguyên tử hêli. Bán kính của ion $^3He^+$ là $a_0/2$, trong đó a_0 là bán kính Bohr, và như vậy, hàm sóng là

$$\psi_{1s}^{H} = Y_{00} \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} ,$$

$$\psi_{1s}^{He^+} = Y_{00} \frac{2}{\left(\frac{a_0}{2}\right)^{3/2}} e^{-2r/a_0} ,$$

$$\psi_{2p}^{He^+} = Y_{1m} \frac{1}{2\sqrt{6}\,(a_0/2)^{3/2}} \frac{2r}{a_0} e^{-r/a_0}$$

$$(m = 1, 0, -1)\,.$$

(a) Biên độ xác suất để ion He^+ ở trạng thái $1s$ là

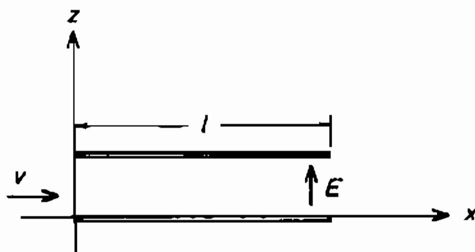
$$A = \int (\psi_{1s}^{He^+})^* \psi_{1s}^{H} d^3x = \frac{2^{7/2}}{a_0^3} \int_0^\infty r^2 e^{-3r/a_0} dr = \frac{16\sqrt{2}}{27}\,.$$

Như vậy, xác suất là $|A|^2 = 2\,(\frac{16}{27})^2 = 0,702$.

(b) Chú ý đến tính trực chuẩn của các hàm cầu, xác suất để $^3He^+$ ở trạng thái $2p$ sẽ bằng không ($\langle Y_{1m} \,|\, Y_{00}\rangle = 0$).

5081

Một chùm nguyên tử hydro được kích thích tới trạng thái $2s$ đi qua giữa hai bản cực của một tụ điện trong đó có một điện trường đều $\mathbf{E}$ tồn tại trên khoảng cách l. Nguyên tử hydro có vận tốc v dọc theo trục x và trường $\mathbf{E}$ hướng theo trục z như được chỉ trong Hình 5.25.



Hình 5.25

Tất cả các trạng thái $n = 2$ của hydro là suy biến khi không có trường $\mathbf{E}$ nhưng một số trạng thái đó sẽ pha trộn nhau khi trường có mặt.

(a) Những trạng thái nào trong số các trạng thái $n = 2$ sẽ được trộn với nhau trong gần đúng bậc nhất của nhiễu loạn?

(b) Tìm tất cả các tổ hợp tuyến tính của những trạng thái $n = 2$ sao cho suy biến được khử càng nhiều càng tốt.

(c) Cho một hệ bắt đầu ra khỏi trạng thái $2s$ vào thời điểm $t = 0$, hãy viết hàm sóng ở thời điểm $t \le \frac{l}{v}$.

(d) Hãy tìm xác suất để chùm hạt ló ra khỏi tụ điện chứa các nguyên tử hydro ở các trạng thái $n = 2$ khác nhau.

(MIT)

Lời giải:

Coi thế năng eEz của electron (điện tích $-e$) của nguyên tử hydro trong điện trường ngoài $E\hat{e}_z$ như là một nhiễu loạn. Bởi vì các trạng thái $n = 2$ là suy biến, ta sẽ tính $\langle 2\ell'm'|H'|2\ell m\rangle$, trong đó $H' = eEz$, và $\ell = 0$, $m = 0$. Ta biết rằng, chỉ có các yếu tố ma trận sau đây là khác không

$$\langle 2,\ \ell+1,\ m|z|2,\ell,m\rangle = -\sqrt{\frac{(\ell-m+1)(\ell+m+1)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}}\,\langle 2,\ \ell+1|r|2,\ \ell\rangle\,,$$

với

$$\langle 2,\ \ell+1|r|2,\ \ell\rangle = \frac{3a}{2}\,n\sqrt{n^2-\ell^2}\,.$$

Như vậy, tất cả các yếu tố của ma trận đều bằng không trừ

$$\langle 210|H'|200\rangle = -3eEa\,.$$

(a) Các trạng thái $2s$ và $2p$ sẽ trộn với nhau thông qua bậc nhất của lý thuyết nhiễu loạn, bởi vì, với ma trận H' chỉ những yếu tố giữa các trạng thái có $\Delta\ell = \pm 1$ là khác không.

(b) Ma trận nhiễu loạn là

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & -3eEa \\ -3eEa & 0 \end{pmatrix}\,.$$

nó dẫn đến phương trình trường kì

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -3eEa \\ -3eEa & -\lambda \end{vmatrix} = 0$$

và phương trình này sẽ cho nghiệm riêng là $\pm 3eEa$, các vectơ trạng thái tương ứng sẽ là $\frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{\pm 1}$. Sự suy biến của mức $n = 2$ đã bị khử.

(c) Tại thời điểm $t = 0$, ngay trước khi nguyên tử bay vào điện trường,

$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle + |-\rangle\right),$$

trong đó

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

là các vectơ trạng thái thu được ở câu (b).

Vào thời điểm $0 < t \leq \frac{l}{v}$ khi nguyên tử chịu sự tác động của điện trường,

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{i3eEat/h}|+\rangle + e^{-i3eEat/h}|-\rangle\right)\\ &= \begin{pmatrix}\cos(3eEat/\hbar)\\ i\sin(3eEat/\hbar)\end{pmatrix} = \cos\left(\frac{3eEat}{\hbar}\right)|2s\rangle + i\sin\left(\frac{3eEat}{\hbar}\right)|2p\rangle,\end{aligned}$$

trong đó

$$|2s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},$$

$$|2p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

(d) Với $t \geq \frac{l}{v}$, từ (c) ta tìm được các xác suất

$$|\langle 200|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\frac{3eEat}{\hbar},$$

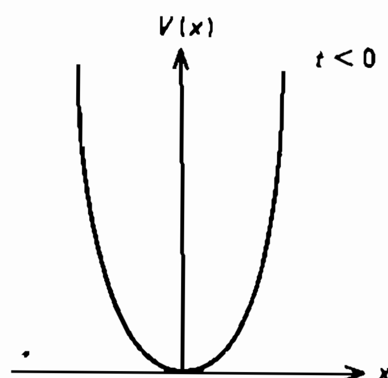
$$|\langle 210|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2\frac{3eEat}{\hbar}.$$

5082

(a) Xét một hạt khối lượng m chuyển động trong hố thế một chiều phụ thuộc thời gian $V(x,t)$ hãy viết phương trình Schrödinger thích hợp cho hai hệ quy chiếu (x,t) và (x',t) chuyển động đối với nhau với vận tốc v (tức là $x = x' + vt$).

(b) Hãy tưởng tượng rằng, một hạt ở trong một hố thế một chiều có dạng $m\omega^2x^2/2$ (Hình 5.26). Vào thời điểm $t = 0$ hố thế bị kích bất ngờ và chuyển động sang phải với vận tốc v (xem Hình 5. 27). Nói một cách khác, giả sử rằng $V(x,t)$ có dạng

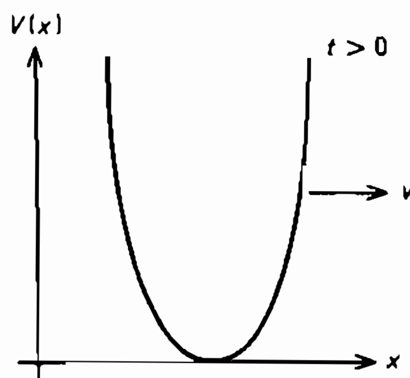
$$V(x,t) = \begin{cases}\frac{1}{2}m\omega^2x^2 & \text{với } t < 0,\\ \frac{1}{2}m\omega^2x'^2 & \text{với } t > 0.\end{cases}$$



Hình 5.26

Nếu khi $t < 0$ hạt ở trạng thái cơ bản khi được xét trong hệ quy chiếu (x, t), hãy tính xác suất để vào thời điểm $t > 0$ nó sẽ ở trạng thái cơ bản khi được quan sát trong hệ (x', t).

(*Columbia*)



Hình 5.27

Lời giải:

(a) Cả hai (x, t) và (x', t) đều là hệ quy chiếu quán tính và do đó phương trình Schrödinger là

+ Đối với hệ (x, t),

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x, t)\right]\psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t),$$

+ Đối với hệ (x', t),

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx'^2} + V'(x', t)\right]\psi(x', t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x', t),$$

trong đó $V'(x', t) = V'(x - vt, t) = V(x, t)$.

(b) Bài toán này cũng giống như **Bài tập 6052** theo các nghĩa sau đây.

Xét một quan sát viên đứng yên trong hệ (x', t). Vào thời điểm $t < 0$ người này sẽ thấy hạt nằm trong trạng thái cơ bản của hố thế V. Vào thời điểm $t = 0$, hố thế V bỗng nhiên chuyển động với một vận tốc v dọc theo trục x. Tình trạng cũng giống hệt nếu V đứng yên nhưng hạt chuyển động với vận tốc $-v$ dọc theo trục $-x$. Vấn đề là tìm xác suất để hạt vẫn ở trong trạng thái cơ bản. **Bài tập 6052** quan tâm đến hạt nhân Al, thông qua việc phát xạ một γ về bên phải nó đã nhận được một vận tốc đều về bên trái. Nội dung vật lý chứa trong bài toán đó giống hệt như trong bài toán này, và do đó chúng ta có thể sử dụng kết quả ở bài toán đó.

5083

Nếu số baryon là bảo toàn, chuyển dời $n \leftrightarrow \bar{n}$ được biết đến với tên gọi dao động nơtron là bị cấm. Giới hạn thực nghiệm về thang thời gian của các dao động như vậy trong không gian tự do và có từ trường bằng không là $\tau_{n-\bar{n}} \geq 3 \times 10^6$ s. Vì nơtron chiếm đa số trong các hạt nhân bền, nên người ta ngây thơ nghĩ rằng, có thể thu được một giới hạn tốt hơn nhiều cho $\tau_{n-\bar{n}}$. Mục tiêu của bài toán này là để hiểu tại sao giới hạn nói trên lại thô như vậy. Gọi H_0 là Hamiltonian của thế giới trong đó không có một tương tác nào làm pha trộn n và $\bar{n}$. Khi đó

$$H_0|n\rangle = m_n c^2|n\rangle \quad \text{và} \quad H_0|\bar{n}\rangle = m_n c^2|\bar{n}\rangle$$

cho các trạng thái đứng yên. Gọi H' là tương tác làm n chuyển thành $\bar{n}$ và ngược lại

$$H'|n\rangle = \varepsilon|\bar{n}\rangle \quad \text{và} \quad H'|\bar{n}\rangle = \varepsilon|n\rangle,$$

trong đó ε là thực và H' không làm quay spin.

(a) Xuất phát với một nơtron ở thời điểm $t = 0$, hãy tính xác suất để nó sẽ được quan sát thấy như một phản nơtron ở thời điểm t. Khi xác suất ban đầu là 50%, gọi thời gian đó là $\tau_{n-\bar{n}}$. Bằng cách đó, hãy chuyển đổi giới hạn thực nghiệm đối với $\tau_{n-\bar{n}}$ thành giới hạn đối với ε. Chú ý rằng $m_n c^2 = 940$ MeV.

(b) Bây giờ ta xét lại bài toán có tính đến sự hiện diện của từ trường Trái Đất ($B_0 \geq \frac{1}{2}$ gauss). Mômen từ của nơtron là $\mu_n \approx -6 \times 10^{-18}$ MeV/gauss. Mômen từ của phản nơtron là ngược lại. Bắt đầu với một nơtron ở thời điểm $t = 0$, hãy tính xác suất để nó sẽ được quan sát thấy như một phản nơtron ở thời điểm t. (Gợi ý: Khi làm việc với các đại lượng nhỏ ta sẽ dừng ở bậc thấp nhất). Bỏ qua những chuyển dời bức xạ có thể có.

(c) Hạt nhân có spin ở trong từ trường khác không. Hãy giải thích sơ bộ và định tính, theo quan điểm của phần (b), vì sao những nơtron ở trong hạt nhân lại bền như vậy, trong khi đó $\tau_{n-\bar{n}}$ chỉ bị giới hạn bởi $\tau_{n-\bar{n}} \geq 3 \times 10^6$s.

(d) Hạt nhân với spin bằng không trong từ trường có giá trị trung bình bằng không. Hãy giải thích ngắn gọn vì sao dao động nơtron trong những hạt nhân như vậy cũng bị cấm.

(*MIT*)

Lời giải:

(a) Để tìm trạng thái riêng của Hamiltonian $H = H_0 + H'$, ta đưa vào biểu diễn nơtron - phản nơtron với các vectơ trạng thái

$$|n\rangle \sim \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\bar{n}\rangle \sim \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Bởi vì

$$\langle n|H_0 + H'|n\rangle = m_n c^2 ,$$
$$\langle \bar{n}|H_0 + H'|n\rangle = \varepsilon$$

ta có phương trình tìm giá trị riêng của năng lượng

$$\begin{pmatrix} m_n c^2 - E & \varepsilon \\ \varepsilon & m_n c^2 - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 .$$

Giải phương trình, ta thu được

$$E_+ = m_n c^2 + \varepsilon , \quad \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$E_- = m_n c^2 - \varepsilon , \quad \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Khi $t = 0$, hệ ở trạng thái nơtron và do đó

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|E_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|E_-\rangle ,$$

trong đó

$$|E_+\rangle \sim \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \ |E_-\rangle \sim \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}.$$

Tại thời điểm t, trạng thái cúa hệ trở thành

$$|\psi, t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_+t/\hbar}|E_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_-t/\hbar}|E_-\rangle .$$

Trong biểu diễn nơtron - phản nơtron, ta có

$$|\psi, t\rangle = e^{-im_nc^2t/\hbar}\begin{pmatrix}\cos\frac{\varepsilon t}{\hbar}\\ -i\sin\frac{\varepsilon}{\hbar}\end{pmatrix},$$

và do đó

$$|\psi, t\rangle = e^{-im_nc^2t/\hbar}\cos\frac{\varepsilon}{\hbar}|n\rangle - ie^{-im_nc^2t/\hbar}\sin\frac{\varepsilon}{\hbar}|\bar{n}\rangle .$$

Xác suất để vào thời điểm t hạt được quan sát thấy như là một phản nơtron sẽ là

$$P(t) = \left|ie^{-im_nc^2t/\hbar}\sin\frac{\varepsilon t}{\hbar}\right|^2 = \sin^2(\varepsilon/\hbar).$$

$\tau_{n-\bar{n}}$ được định nghĩa như là thời điểm tại đó $P = \frac{1}{2}$, nghĩa là,

$$\tau_{n-\bar{n}} = \frac{\hbar}{\varepsilon}\arcsin\frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{\pi\hbar}{4\varepsilon}.$$

Như vậy, vì $T_{n-\bar{n}} \geq 3\times 10^6$ s, nên giới hạn thực nghiệm đối với ε là $\varepsilon \leq \frac{h}{8\times 3\times 10^6} = 1,7\times 10^{-28}$ MeV.

(b) Chú ý rằng H' không làm thay đổi spin, sau khi đặt từ trường ta có thể dùng biểu diễn nơtron -phản nơtron

$$n\uparrow\sim\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \ \bar{n}\uparrow\sim\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}, \ n\downarrow\sim\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}, \ \bar{n}\downarrow\sim\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

và tính yếu tố ma trận của $H' + \mu B_0$. Khi đó ta sẽ thu được Hamiltonian nhiễu loạn

$$\begin{pmatrix} -\mu_n B_0 & \varepsilon & 0 & 0 \\ \varepsilon & -\mu_{\bar{n}} B_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_n B_0 & \varepsilon \\ 0 & 0 & \varepsilon & \mu_{\bar{n}} B_0 \end{pmatrix}$$

với $\mu_n \approx -6 \times 10^{-18}$ MeV/Gs, $\mu_{\bar{n}} \approx 6 \times 10^{-18}$ MeV/Gs.

Điều này dẫn đến hai phương trình vectơ riêng

$$\begin{pmatrix} -\mu_n B_0 - E^{(1)} & \varepsilon \\ \varepsilon & \mu_n B_0 - E^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \uparrow \\ b \uparrow \end{pmatrix} = 0\,,$$

$$\begin{pmatrix} \mu_n B_0 - E^{(1)} & \varepsilon \\ \varepsilon & -\mu_n B_0 - E^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \downarrow \\ b \downarrow \end{pmatrix} = 0\,,$$

trong đó, ta đã sử dụng hệ thức $\mu_{\bar{n}} = -\mu_n$.

Giải hai phương trình trên, ta thu được

$$E_{\pm}^{(1)} = \pm\lambda = \pm\sqrt{\varepsilon^2 + (\mu_n B_0)^2}\,,$$

và do đó

$$\begin{pmatrix} a \uparrow \\ b \uparrow \end{pmatrix}_+ = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda - \mu_n B_0} \\ \sqrt{\lambda + \mu_n B_0} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a \uparrow \\ b \uparrow \end{pmatrix}_- = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda + \mu_n B_0} \\ -\sqrt{\lambda - \mu_0 B_0} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} a \downarrow \\ b \downarrow \end{pmatrix}_+ = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda + \mu_n B_0} \\ \sqrt{\lambda - \mu_n B_0} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a \downarrow \\ b \downarrow \end{pmatrix}_- = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda - \mu_n B_0} \\ -\sqrt{\lambda + \mu_0 B_0} \end{pmatrix}.$$

Khi $t = 0$, hệ ở trạng thái nơtron

$$n \uparrow \sim \sqrt{\frac{\lambda - \mu_n B_0}{2\lambda}} \begin{pmatrix} a \uparrow \\ b \uparrow \end{pmatrix}_+ + \sqrt{\frac{\lambda + \mu_n B_0}{2\lambda}} \begin{pmatrix} a \uparrow \\ b \uparrow \end{pmatrix}_-\,,$$

$$n \downarrow \sim \sqrt{\frac{\lambda - \mu_n B_0}{2\lambda}} \begin{pmatrix} a \downarrow \\ b \downarrow \end{pmatrix}_+ + \sqrt{\frac{\lambda - \mu_n B_0}{2\lambda}} \begin{pmatrix} a \downarrow \\ b \downarrow \end{pmatrix}_-\,.$$

Tại thời điểm t, các trạng thái của hệ là

$$(\uparrow) \sim e^{-im_n c^2 t/\hbar}\,\frac{1}{2\lambda} \times \begin{pmatrix} (\lambda - \mu_n B_0)e^{-i\lambda t/\hbar} + (\lambda + \mu_n B_0)e^{i\lambda t/\hbar} \\ \sqrt{(\lambda^2 - (\mu_n B_0)^2}\,(e^{-i\lambda t/\hbar} - e^{i\lambda t/\hbar}) \end{pmatrix},$$

$$(\downarrow) \sim e^{-im_n c^2 t/\hbar}\,\frac{1}{2\lambda} \times \begin{pmatrix} (\lambda + \mu_n B)e^{-i\lambda t/\hbar} + (\lambda - \mu_n B_0)e^{i\lambda t/\hbar} \\ \sqrt{(\lambda^2 - (\mu_n B_0)^2}\,(e^{-i\lambda t/\hbar} - e^{i\lambda t/\hbar}) \end{pmatrix}.$$

Như vậy, xác suất để $n\uparrow \to \bar{n}\uparrow$ là

$$P_{n\uparrow\to\bar{n}\uparrow}(t) = \frac{\varepsilon^2}{\lambda^2}\sin^2\frac{\lambda t}{\hbar} = \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 + (\mu_n B_0)^2}\sin^2\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + (\mu_n B_0)^2}\,t}{\hbar},$$

và để $n\downarrow \to \bar{n}\downarrow$ là

$$P_{n\downarrow\to\bar{n}\downarrow}(t) = \frac{\varepsilon^2}{\lambda^2}\sin^2\frac{\lambda t}{\hbar} = \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 + (\mu_n B_0)^2}\sin^2\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + (\mu_n B_0)^2}\,t}{\hbar}.$$

Cuối cùng, nếu nơtron không phân cực, xác suất để $n \to \bar{n}$ là

$$P(t) = \frac{1}{2}P_{n\uparrow\to\bar{n}\uparrow}(t) + \frac{1}{2}P_{n\downarrow\to\bar{n}\downarrow}(t) = \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 + (\mu_n B_0)^2}\sin^2\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + (\mu_n B_0)^2}\,t}{\hbar},$$

Điều đó có nghĩa là phân cực của nơtron không có ảnh hưởng gì đến xác suất chuyển dời.

Vì $\mu_n B_0 \gg \varepsilon$,

$$P(t) \le \left(\frac{1,65 \times 10^{-28}}{6 \times 10^{-18} \times 1/2}\right)^2 \approx 0,3 \times 10^{-20},$$

Điều đó chỉ ra rằng xác suất chuyển dời là cực nhỏ.

(c) Nếu spin hạt nhân khác không, từ trường bên trong một hạt nhân là rất mạnh, mạnh hơn so với 0,5 Gs. Khi đó kết quả ở (b) chỉ ra rằng

$$P_{n \to \bar{n}} \ll 10^{-20},$$

điều này giải thích vì sao nơtron là bền bên trong một hạt nhân.

(d) Nếu spin hạt nhân bằng không, thì giá trị trung bình của từ trường bên trong hạt nhân là bằng không. Nói chung, điều này có nghĩa là từ trường bên ngoài hạt nhân là bằng không trong khi từ trường bên trong hạt nhân là khác không, và có khi lại còn rất lớn, và kết quả là $P_{n \to \bar{n}}$ là rất nhỏ. Ngoài ra, ngay cả khi từ trường bên trong hạt nhân lấy trung bình trong một khoảng thời gian rất dài là bằng không, nó cũng sẽ không bằng không tại từng thời điểm. Chỉ cần từ trường bên trong hạt nhân tồn tại, $P_{n \to \bar{n}}$ sẽ trở nên rất nhỏ. Sự dao động nơtron cũng lại bị cấm.

PHẦN VI

LÝ THUYẾT TÁN XẠ VÀ CÁC CHUYỂN DỜI LƯỢNG TỬ

6001

Dẫn ra biểu thức cơ học lượng tử cho tiết diện tán xạ của sóng s lên quả cầu rắn bán kính R.

(*MIT*)

Lời giải

Vai trò của quả cầu rắn tương đương với thế tương tác có dạng

$$V(r) = \begin{cases} \infty & (r < R), \\ 0 & (r > R). \end{cases}$$

Kí hiệu hàm sóng xuyên tâm của sóng s là $R_0(r) = \chi_0(r)/r$. Khi đó phương trình Schrödinger có thể viết dưới dạng

$$\chi_0''(r) + k^2\chi_0(r) = 0 \qquad (r > R),$$

với

$$\chi_0(r) = 0 \qquad (r < R), \qquad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}.$$

Nghiệm đối với trường hợp $r > R$ là $\chi_0(r) = \sin(kr + \delta_0)$. Tính chất liên tục của hàm sóng tại $r = a$ cho ta

$$\sin(kR + \delta_0) = 0,$$

Điều này dẫn đến $\delta_0 = n\pi - kR$, hay $\sin\delta_0 = (-1)^{n+1}\sin kR$ ($n = 0, 1, 2, \ldots$). Do đó, tiết diện tán xạ toàn phần của sóng s là

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2 kR.$$

Trong vùng năng lượng thấp, $k \to 0$, $\sin kR \approx kR$, vì thế $\sigma_t = 4\pi R^2$. Đối với vùng năng lượng cao, $k \to \infty$ và $\sigma_t \approx 0$.

6002

Tầm tác dụng của thế tương tác giữa hai nguyên tử hydro là khoảng 4 Å. Với một chất khí ở trạng thái cân bằng nhiệt, hãy đánh giá bằng số nhiệt độ

mà dưới đó thì tán xạ nguyên tử – nguyên tử chủ yếu là sóng s.

(*MIT*)

Lời giải:

Bài toán liên quan đến tán xạ nguyên tử - nguyên tử trong một khối khí. Nếu chủ yếu chỉ có sóng riêng phần s tham gia, thì nguyên lý bất định đòi hỏi $\mu v_r a \leq \hbar$, trong đó $\mu = \frac{1}{2} m_p$ là khối lượng rút gọn của hai nguyên tử, $\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ là vận tốc chuyển động tương đối của hai nguyên tử với các vận tốc tương ứng $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$, $a = 4$ Å. Khi đạt tới trạng thái cân bằng thì,

$$\langle v \rangle = 0, \qquad \frac{1}{2} m_p \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} kT,$$

với k là hằng số Boltzmann và T là nhiệt độ tuyệt đối. Giá trị bình phương trung bình của vận tốc tương đối v_r là

$$\langle v_r^2 \rangle = \langle (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)^2 \rangle = \langle v_1^2 + v_2^2 - 2\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 \rangle = 2\langle v^2 \rangle = \frac{6kT}{m_p},$$

vì khi lấy trung bình $\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 = 0$, $\langle v_1^2 \rangle = \langle v_2^2 \rangle = \langle v^2 \rangle$. Do đó

$$\mu a v_r \approx \frac{m_p a}{2} \sqrt{\frac{6kT}{m_p}} \leq \hbar,$$

nghĩa là,

$$T \leq \frac{2\hbar^2}{3m_p c^2} \left(\frac{c}{a}\right)^2 \frac{1}{k} = \frac{2 \times (6,58 \times 10^{-16})^2}{3 \times 938 \times 10^6} \times \left(\frac{3 \times 10^{10}}{4 \times 10^{-8}}\right)^2 \frac{1}{8,62 \times 10^{-5}}$$
$$= 2^\circ \text{K}.$$

Như vậy, ở nhiệt độ thông thường thì tán xạ của các sóng riêng phần khác cũng cần được tính đến.

6003

Một hạt phi tương đối tính có khối lượng m và năng lượng E tán xạ theo các quy luật của cơ học lượng tử lên một thế xuyên tâm $V(r)$ được cho bởi công thức sau

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} U(r), \qquad U(r) = -2\left(\frac{\lambda}{\cosh \lambda r}\right)^2,$$

trong đó λ là một tham số. Thế tương tác của hạt có tính chất là tiết diện tán xạ $\sigma(E)$ càng lớn khi $E \to 0$, và phân kì tại $E = 0$. Rõ ràng là khi E rất nhỏ, chủ yếu sóng s ($l = 0$) sẽ cho đóng góp vào tiết diện tán xạ. Vì vậy với E nhỏ ta chỉ cần tính biên độ sóng riêng phần $l = 0$. Hãy tính tiết diện tán xạ toàn phần của hạt, biết rằng phương trình

$$\frac{d^2\phi}{dr^2} + A\phi = U(r)\,\phi\,,$$

với A là hằng số dương, có nghiệm tổng quát là

$$\phi = \alpha(\lambda \tanh \lambda r - ik)\,e^{ikr} + \beta(\lambda \tanh \lambda r + ik)\,e^{-ikr}\,.$$

trong đó $k = \sqrt{A}$ còn α và β là các hằng số. Lưu ý rằng $\tanh x = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$ và tính $\sigma(E)$ với $E \to 0$.

(*CUS*)

Lời giải:

Sóng riêng phần s là đối xứng cầu và phương trình của nó là

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\phi(r)\right) + \frac{\hbar^2}{2m}U(r)\,\phi(r) = E\phi(r)\,.$$

Kí hiệu $R(r) = \phi(r)\,r$, phương trình trên trở thành

$$R''(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \frac{\hbar^2}{2m}U(r)\right]R(r) = 0\,,$$

hay

$$R''(r) + \frac{2mE}{\hbar^2}R(r) = U(r)\,R(r)\,.$$

Nghiệm của phương trình này là

$$R(r) = \alpha(\lambda \tanh \lambda r - ik)\,e^{ikr} + \beta(\lambda \tanh \lambda r + ik)\,e^{-ikr}\,.$$

trong đó

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\,.$$

Xét khi $r \to 0$. Vì $\phi(0)$ hữu hạn, $R \to 0$. Vì $\tanh \lambda r \to \lambda r$, $e^{ikr} \to 1$, (khi r tiến tới 0) ta có

$$R(r) \approx \alpha(\lambda^2 r - ik) + \beta(\lambda^2 r + ik) \to \alpha(-ik) + \beta(ik) = 0\,,$$

nên $\alpha = \beta$. Xét giới hạn $r \to \infty$. Vì $\tanh \lambda r \to 1$, nên khi $r \to \infty$ ta có

$$\begin{aligned} R(r) &\to \alpha(\lambda - ik)\, e^{ikr} + \beta(\lambda + ik)\, e^{-ikr} \\ &= \alpha[(\lambda - ik)\, e^{ikr} + (\lambda + ik)\, e^{-ikr}] \\ &= \alpha\sqrt{\lambda^2 + k^2}\,(e^{ikr - i\alpha_1} + e^{-ikr + i\alpha_1}) \\ &= \alpha\sqrt{\lambda^2 + k^2} \cdot 2\cos(kr - \alpha_1) \\ &= 2\alpha\sqrt{\lambda^2 + k^2}\, \sin\left(kr + \frac{\pi}{2} - \alpha_1\right) \sim \sin(kr + \delta_0) \end{aligned}$$

trong đó

$$\delta_0 = \frac{\pi}{2} - \alpha_1 ,$$

với α_1 được xác định từ phương trình

$$\tan\alpha_1 = k/\lambda, \qquad \text{hay} \qquad \alpha_1 = \tan^{-1} k/\lambda .$$

Do vậy, tiết diện tán xạ toàn phần là

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 = \frac{4\pi}{k^2}\cos^2\alpha_1 .$$

Khi năng lượng thấp, $E \to 0$, $k \to 0$, $\alpha_1 \to 0$, nên

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k^2} = \frac{2\pi\hbar^2}{mE} .$$

6004

Một hạt có khối lượng m tương tác với một thế đối xứng cầu trong không gian ba chiều có dạng $V(\mathbf{r}) = -C\delta(|\mathbf{r}| - a)$. Nói cách khác, thế là một hàm delta, luôn bằng 0 chỉ trừ khi hạt cách tâm thế một khoảng đúng bằng "a". (Ở đây C là một hằng số dương).

(a) Tìm giá trị nhỏ nhất của hằng số C để có thể tồn tại trạng thái liên kết.

(b) Xét một thí nghiệm về tán xạ trong đó hạt tiến tới thế với vận tốc nhỏ. Trong trường hợp này, tiết diện tán xạ bằng bao nhiêu? Phân bố góc sẽ như thế nào?

(Princeton)

Lời giải:

(a) Giả sử hàm riêng của một trạng thái liên kết của hệ một hạt có dạng

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi) .$$

Khi đó, hàm sóng xuyên tâm $R(r)$ thoả mãn phương trình

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[(ik)^2 + \frac{2mC}{\hbar^2}\delta(|\mathbf{r}| - a) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0\,. \qquad (1)$$

trong đó $k = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$. Chú ý rằng $E < 0$ đối với trạng thái liên kết. Nếu $r \neq a$, phương trình trên sẽ là phương trình Bessel cầu với biến ảo. Với $r < a$, nghiệm hữu hạn tại $r = 0$ là

$$R(r) = A_k j_l(ikr)\,,$$

trong đó j_l là hàm cầu Bessel loại một bậc l. Với $r > a$ nghiệm hữu hạn khi $r \to \infty$ là

$$R(r) = B_k h_l^{(1)}(ikr)\,,$$

trong đó $h_l^{(1)}$ là hàm cầu Bessel loại 3 (hàm Hankel) bậc l. Vì hàm sóng liên tục tại $r = a$ nên

$$A_k j_\ell(ika) = B_k h_\ell^{(1)}(ika)\,.$$

Lấy tích phân phương trình (1) từ $a - \varepsilon$ đến $a + \varepsilon$, trong đó ε là một số dương nhỏ, sau đó cho $\varepsilon \to 0$, ta được

$$R'(a+0) - R'(a-0) = -C'R(a)\,, \qquad (2)$$

trong đó

$$C' = \frac{2mC}{\hbar^2}\,.$$

Giả sử có ít nhất một trạng thái liên kết. Xét trạng thái cơ bản $l = 0$. Với trạng thái này ta có

$$R(r) = \begin{cases} Aj_0(ikr) = A\,\dfrac{\sin(ikr)}{ikr}\,, & r < a, \\ Bh_0^{(1)}(ikr) = B\,\dfrac{(-1)\,e^{-kr}}{kr}\,, & r > a. \end{cases}$$

Lấy đạo hàm của $R(r)$ và cho $r \to a$, ta thu được

$$R'(a+0) = \frac{B}{k}\cdot\frac{e^{-ka}}{a}\left(k + \frac{1}{a}\right)\,,$$

$$R'(a-0) = \frac{A}{k}\left[\frac{k\cosh(ka)}{a} - \frac{\sinh(ka)}{a^2}\right]\,.$$

Thay những biểu thức trên vào phương trình (2) ta được

$$aC' = \frac{2ka}{1 - e^{-2ka}} .$$

Vì $x > 0$, $x \geq 1 - e^{-x}$, nên $aC' \geq 1$và

$$C'_{\min} = 1/a, \qquad \text{hay} \qquad C_{\min} = \frac{\hbar^2}{2ma} .$$

Đây là giá trị nhỏ nhất của C để tồn tại trạng thái liên kết.

(b) Ta sử dụng phương pháp sóng riêng phần. Khi hạt tới thế với vận tốc nhỏ, chỉ có sóng riêng phần với $\ell = 0$ là có vai trò quan trọng. Phương trình tương ứng cho hàm sóng xuyên tâm là

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \left[k^2 + \frac{2mC}{\hbar^2} \delta(r - a)\right] R = 0 .$$

Đặt $R(r) = \chi_0(r)/r$ phương trình trên trở thành

$$\chi_0'' + \left[k^2 + \frac{2mC}{\hbar^2} \delta(r - a)\right] \chi_0 = 0 . \qquad (3)$$

Nghiệm hữu hạn khi $r \to 0$ và $r \to \infty$ của phương trình này là

$$\chi_0(r) = \begin{cases} A \sin kr, & r < a , \\ \sin(kr + \delta_0), & r > a . \end{cases}$$

Do $\chi_0(r)$ liên tục tại $r = a$ nên ta có

$$A \sin ka = \sin(ka + \delta_0) .$$

Lấy tích phân phương trình từ $a - \varepsilon$ đến $a + \varepsilon$ ta thu được

$$\chi_0'(a + \varepsilon) - \chi_0'(a - \varepsilon) = -\frac{2mC}{\hbar^2} \chi_0(a) .$$

Thay vào biểu thức của $\chi_0(r)$, ta được

$$\frac{ka}{\tan(ka + \delta_0)} - \frac{ka}{\tan ka} = -\frac{2mCa}{\hbar^2} .$$

Khi $k \to 0$, phương trình trên trở thành

$$\frac{ka}{\tan\delta_0} - 1 = -\frac{2mCa}{\hbar^2},$$

hay

$$\tan\delta_0 = \frac{ka}{1 - \dfrac{2maC}{\hbar^2}},$$

nghĩa là,

$$\sin\delta_0 = \frac{ka}{\sqrt{k^2a^2 + \left(1 - \dfrac{2maC}{\hbar^2}\right)^2}} \approx \frac{ka}{\left(1 - \dfrac{2maC}{\hbar^2}\right)}.$$

Do đó tiết diện tán xạ toàn phần là

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 \approx \frac{4\pi a^2}{\left(1 - \dfrac{2maC}{\hbar^2}\right)^2}.$$

Chú ý rằng, với vận tốc nhỏ thì chỉ cần xét sóng s ($l = 0$) và tiết diện tán xạ vi phân đơn giản là

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{k^2}\sin^2\delta_0 = a^2\left(1 - \frac{2maC}{\hbar^2}\right)^{-2},$$

và không phụ thuộc vào góc. Vì vậy, sự phân bố góc là đẳng hướng.

6005

(a) Tìm độ dịch pha của sóng s như là một hàm của số sóng k, với một thế đẩy đối xứng cầu có giá trị vô cùng lớn bên trong vùng bán kính r_0, và bằng không ở ngoài vùng bán kính r_0.

(b) Hãy biện luận về sự biến thiên của độ dịch pha của các sóng riêng phần bậc cao hơn khi $k \to 0$.

(Wisconsin)

Lời giải:

(a) Đây là một bài toán tán xạ điển hình mà ta có thể giải một cách dễ dàng bằng phương pháp sóng riêng phần. Thế tương tác được biểu diễn dưới

dạng

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r < r_0, \\ 0, & r > r_0. \end{cases}$$

Hàm sóng xuyên tâm của sóng riêng phần ℓ là

$$R_\ell(kr) = \begin{cases} 0, & r < r_0, \\ j_\ell(kr)\cos\delta_\ell - n_\ell(kr)\sin\delta_\ell, & r > r_0. \end{cases} \tag{2}$$

ở đây j_ℓ và n_ℓ là các hàm cầu Bessel và hàm cầu Neumann bậc ℓ. Các hàm này có các dạng tiệm cận

$$j_\ell(x) \xrightarrow{x\to\infty} \frac{1}{x}\sin(x - \ell\pi/2),$$

$$n_\ell(x) \xrightarrow{x\to\infty} -\frac{1}{x}\cos(x - \ell\pi/2).$$

Do vậy, với $r > r_0$ ta có

$$R_\ell(kr) \xrightarrow{kr\to\infty} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right).$$

Độ dịch pha δ_ℓ có thể được xác định từ tính chất liên tục của hàm sóng tại $r = r_0$. Đặt $kr_0 = x$, điều kiện liên tục của hàm sóng là

$$R_\ell(x) = j_\ell(x)\cos\delta_\ell - n_\ell(x)\sin\delta_\ell = 0$$

suy ra

$$\tan\delta_\ell = \frac{j_\ell(x)}{n_\ell(x)}.$$

Trong giới hạn năng lượng thấp $x \to 0$, các hàm đó có dạng tiệm cận

$$j_\ell(x) \xrightarrow{x\to 0} \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!},$$

$$n_\ell(x) \xrightarrow{x\to 0} -\frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}},$$

do đó

$$\tan\delta_\ell = \frac{j_\ell(x)}{n_\ell(x)} \xrightarrow{x\to 0} -\frac{x^{2\ell+1}}{[(2\ell-1)!!]^2\,(2\ell+1)}.$$

Vì thế độ dịch pha của sóng s ($\ell = 0$) là

$$\tan\delta_0 = -x = -kr_0 .$$

Đại lượng này cho đóng góp hữu hạn vào quá trình tán xạ với tiết diện tán xạ toàn phần tương ứng là

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 \approx \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2 \approx 4\pi r_0^2 .$$

Sự tán xạ là đối xứng cầu và tiết diện tán xạ toàn phần lớn gấp bốn lần giá trị cổ điển πr_0^2.

(b) Xét giới hạn năng lượng thấp $k \to 0$. Vì

$$\tan\delta_\ell \approx -\frac{x^{2\ell+1}}{[(2\ell-1)!!]^2\,(2\ell+1)},$$

nên δ_ℓ giảm rất nhanh khi ℓ tăng. Tất cả các độ dịch pha đều bằng 0 khi $k \to 0$, trừ trường hợp sóng riêng phần với $l = 0$. Do vậy, sóng s chiếm ưu thế trong quá trình tán xạ ở năng lượng thấp. Về phương diện vật lý, các hạt với các sóng riêng phần bậc cao ở xa tâm của thế tương tác hơn, do đó ảnh hưởng của thế tương tác lên các hạt đó nhỏ hơn, dẫn đến $|\delta_\ell|$ nhỏ hơn.

6006

Một hạt có khối lượng m bị tán xạ bởi một thế xuyên tâm

$$V(r) = -\frac{\hbar^2}{ma^2}\frac{1}{\cosh^2(r/a)},$$

trong đó a là một hằng số. Biết rằng phương trình

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k^2y + \frac{2}{\cosh^2 x}\,y = 0$$

có các nghiệm $y = e^{\pm ikx}(\tanh x \mp ik)$, hãy tính đóng góp của sóng s vào tiết diện tán xạ toàn phần ở năng lượng E. *(MIT)*

Lời giải:

Đặt $\chi_0(r) = rR(r)$ ta có phương trình Schrödinger cho hàm sóng xuyên tâm của sóng s ($\ell = 0$)

$$\frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + \frac{\hbar^2}{ma^2}\frac{1}{\cosh^2(r/a)}\right]\chi_0(r) = 0.$$

Kí hiệu $x = r/a$, $y(x) = \chi_0(r)$ và $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, phương trình trên trở thành

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} + k^2a^2y(x) + \frac{2}{\cosh^2(x)}\, y(x) = 0\,.$$

Phương trình này có nghiệm $y = e^{\pm iakx}(\tanh x \mp iak)$. Để R hữu hạn khi $r = 0$ ta đòi hỏi $y(0) = 0$. Nghiệm thoả mãn điều kiện này có dạng

$$\begin{aligned} y(x) &= e^{iakx}(\tanh x - iak) + e^{-iakx}(\tanh x + iak) \\ &= 2\cos(akx)\,\tanh x + 2ak\,\sin(akx)\,, \end{aligned}$$

hay

$$\chi_0(r) = 2\cos(kr)\,\tanh\left(\frac{r}{a}\right) + 2ak\,\sin(kr)\,.$$

Vì vậy

$$\frac{1}{\chi_0}\frac{d\chi_0}{dr} = \frac{ak^2\cos(kr) - k\,\sin(kr)\,\tanh\left(\frac{r}{a}\right) + \frac{1}{a}\cos(kr)\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{r}{a}\right)}{ak\sin(kr) + \cos(kr)\,\tanh\left(\frac{r}{a}\right)}$$

$$\xrightarrow{r\to\infty} \frac{ak^2\cos(kr) - k\,\sin(kr)}{ak\,\sin(kr) + \cos(kr)} = k\,\frac{ak\cot(kr) - 1}{\cot(kr) + ak}\,.$$

Mặt khác nếu viết χ_0 dưới dạng

$$\chi_0(r) = \sin(kr + \delta_0)\,,$$

thì do

$$\frac{1}{\chi_0}\frac{d\chi_0}{dr} = k\,\cot(kr + \delta_0) = k\,\frac{\cot(kr)\,\cot\,\delta_0 - 1}{\cot(kr) + \cot\delta_0}\,,$$

nên ta có

$$\cot\delta_0 = ak\,,$$

hay là

$$\sin^2\delta_0 = \frac{1}{1 + a^2k^2}\,.$$

Vậy đóng góp của sóng s vào tiết diện tán xạ toàn phần là

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k^2}\,\sin^2\delta_0 = \frac{4\pi}{k^2}\,\frac{1}{1 + a^2k^2} = \frac{2\pi\hbar^2}{mE}\,\frac{1}{1 + \dfrac{2a^2mE}{\hbar^2}}\,.$$

6007

Một hạt có spin bằng 0, khối lượng m, năng lượng E tán xạ với góc θ trên một hố thế hút dạng chữ nhật $V(r)$

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & 0 < r < a, \quad V_0 > 0, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

(a) Thiết lập mối liên hệ giữa các tham số V_0, a, m và các hằng số vật lý sao cho tiết diện tán xạ bằng 0 khi năng lượng bằng 0. Kết quả sẽ là một phương trình siêu việt xác định, song không cần phải giải ra số cụ thể. Với các hằng số thoả mãn điều kiện đầu bài, khi $E \to 0$, thì tiết diện tán xạ vi phân sẽ có dạng sau

$$\frac{\partial\sigma}{\partial\Omega} \xrightarrow[E\to 0]{} E^{\lambda} F(\cos\theta).$$

(b) Xác định giá trị bằng số của số mũ λ.

(c) Hàm phân bố góc $F(\cos\theta)$ là một đa thức đối với biến số $\cos\theta$. Luỹ thừa lớn nhất của $\cos\theta$ trong đa thức này bằng bao nhiêu?

(*Princeton*)

Lời giải:

(a) Khi năng lượng gần bằng 0, chỉ có sóng riêng phần với $l = 0$ có vai trò quan trọng. Viết hàm sóng xuyên tâm dưới dạng $R(r) = \chi(r)/r$, thì $\chi(r)$ phải thoả mãn phương trình

$$\begin{cases} \chi'' + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\chi = 0, & r > a, \\ \chi'' + \dfrac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)\chi = 0, & 0 < r < a \end{cases}$$

với $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $K = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$. Phương trình trên có các nghiệm

$$\chi(r) = \sin(kr + \delta_0), \qquad r > a,$$

$$\chi(r) = A\sin(Kr), \qquad 0 < r < a.$$

Vì cả $\chi(r)$ và $\chi'(r)$ đều liên tục tại $r = a$, nên

$$\sin(ka + \delta_0) = A\sin(Ka),$$

$$k\cos(ka + \delta_0) = KA\cos(Ka),$$

hay

$$K\,\tan(ka+\delta_0)=k\,\tan(Ka)\,,$$

và do vậy

$$\delta_0=\tan^{-1}\left[\frac{k}{K}\tan(Ka)\right]-ka\,.$$

Khi $E\to 0$

$$k\to 0,\ K\to k_0\equiv\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}\,,$$

cho nên

$$\delta_0\to k\left[\frac{\tan(k_0a)}{k_0}-a\right].$$

Để tiết diện tán xạ toàn phần bằng 0 khi $E=0$, thì

$$\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0\to 4\pi a^2\left[\frac{\tan(k_0a)}{k_0a}-1\right]^2=0\,,$$

hay

$$\tan(k_0a)=k_0a\,,$$

nghĩa là,

$$\tan\left(\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a\right)=\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a\,,$$

đây chính là phương trình siêu việt mà các tham số V_0, a, m và hằng số vật lý $\hbar$ phải thoả mãn.

(b) & (c) Khi $k\to 0$, sóng riêng phần với $\ell=0$ vẫn cho đóng góp rất quan trọng vào tiết diện tán xạ vi phân, mặc dù đóng góp đó cũng tiến dần tới 0. Khai triển $\tan(Ka)$ thành chuỗi Taylor theo k, ta có

$$\tan(Ka)=\tan(a\sqrt{k^2+k_0^2})=\tan(k_0a)+\frac{ak^2}{2k_0\cos^2(k_0a)}+\cdots\,.$$

Bỏ qua các số hạng bậc cao hơn k^2, ta thu được

$$\begin{aligned}
\delta_0 &= \tan^{-1}\left[\frac{k}{K}\tan(Ka)\right] - ka \\
&\approx \tan^{-1}\left\{\frac{k}{k_0}\left(1-\frac{k^2}{2k_0^2}\right)\left[\tan(k_0a)+\frac{k^2a}{2k_0\cos^2(k_0a)}\right]\right\} - ka \\
&\approx \tan^{-1}\left\{\frac{k}{k_0}\tan(k_0a)-\frac{k^3}{2k_0^3}\tan(k_0a)+\frac{k^3a}{2k_0^2\cos^2(k_0a)}\right\} - ka \\
&\approx \tan^{-1}\left\{ka-\frac{k^3a}{2k_0^2}+\frac{k^3a}{2k_0^2\cos^2(k_0a)}\right\} - ka \\
&\approx \frac{k^3a}{2k_0^2\cos^2(k_0a)}-\frac{k^3a}{2k_0^2}-\frac{k^3a^3}{3}\,.
\end{aligned}$$

Do vậy

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &\approx \frac{1}{k^2}\sin^2\delta_0 \\
&\approx k^4F(k_0,\,a) \\
&= E^2\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 F(k_0,\,a)\,.
\end{aligned}$$

Vì thế tiết diện tán xạ vi phân trên đơn vị góc khối coi như đẳng hướng và tỉ lệ với E^2 khi $E\to 0$. Để tìm đóng góp của sóng riêng phần với $\ell=1$, ta xét phương trình của sóng xuyên tâm tương ứng

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R\right)+\left(K^2-\frac{2}{r^2}\right)R=0 \quad (r<a)\,,$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R\right)+\left(k^2-\frac{2}{r^2}\right)R=0 \quad (r>a)\,.$$

Nghiệm của phương trình này có dạng hàm cầu Bessel bậc nhất $j_1(p)=\frac{\sin\rho}{\rho^2}-\frac{\cos\rho}{\rho}$, hay

$$R_1=\begin{cases}\dfrac{\sin(Kr)}{(Kr)^2}-\dfrac{\cos(Kr)}{Kr}\,, & 0<r<a\,,\\[2ex] A\left[\dfrac{\sin(kr+\delta_1)}{(kr)^2}-\dfrac{\cos(kr+\delta_1)}{kr}\right], & r>a\,.\end{cases}$$

Tính liên tục của hàm sóng R_1 và đạo hàm bậc nhất của $r^2 R$ tại $r = a$ cho ta

$$\frac{\sin Ka}{(Ka)^2} - \frac{\cos Ka}{Ka} = A\left[\frac{\sin(ka+\delta_1)}{(ka)^2} - \frac{\cos(ka+\delta_1)}{ka}\right],$$

$$\sin Ka = A\sin(ka+\delta_1).$$

Lấy tỉ số của hai phương trình ta được $k^2[1 - Ka\cot(Ka)] = K^2[1 - ka\cot(ka+\delta_1)]$, hay

$$\tan(ka+\delta_1) = ka\left[1 + \frac{k^2}{k_0^2} - \frac{k^2 a\cot(Ka)}{k_0} + O(k^4)\right]$$
$$= ka + O(k^3),$$

bởi vì

$$K = \sqrt{k^2 + k_0^2} \simeq k_0\left[1 + \frac{1}{2}\frac{k^2}{k_0^2} + O(k^4)\right].$$

Suy ra

$$\delta_1 = \tan^{-1}[ka + O(k^3)] - ka = -\frac{1}{3}(ka)^3 + O(k^3) = O(k^3).$$

Vì thế đóng góp vào $\frac{\partial\sigma}{\partial\Omega}$ là

$$\frac{9}{k^2}\sin^2\delta_1\cos^2\theta,$$

cũng tỉ lệ với k^4. Tương tự, với $l = 2$,

$$R_2 = \begin{cases} \left[\dfrac{3}{(Kr)^3} - \dfrac{1}{Kr}\right]\sin(Kr) - \dfrac{3\cos(Kr)}{(Kr)^2}, & 0 < r < a, \\ \left[\dfrac{3}{(kr)^3} - \dfrac{1}{kr}\right]\sin(kr+\delta_2) - \dfrac{3\cos(kr+\delta_2)}{(kr)^2}, & r > a. \end{cases}$$

Tính liên tục của R và $(r^3 R_2)'$ tại $r = a$ cho ta

$$\frac{k^2}{K^2}\,\frac{[\tan(ka+\delta_2) - ka]}{[\tan(Ka) - Ka]} = \frac{[3-(ka)^2]\tan(ka+\delta_2) - 3ka}{[3-(Ka)^2]\tan(Ka) - 3Ka}.$$

Đặt $y = \tan(ka+\delta_2) - ka$. Phương trình trên trở thành

$$\left[\frac{3}{(ka)^3} - \frac{1}{ka}\right]y - 1 = \frac{y(-1 + O(k))}{bK^2(1 + O(k^2))},$$

trong đó

$$b = \frac{a}{2\cos^2(k_0 a) - k_0} .$$

Do vậy

$$\begin{aligned} y &= \frac{1}{\frac{3}{(ka)^3} - \frac{1}{ka} + \frac{1}{bK^2} + O(k)} \\ &= \frac{1}{\frac{3}{(ka)^3}\left[1 - \frac{(ka)^2}{3} + \frac{(ka)^3}{3bK^2} + O(k^4)\right]} \\ &= \frac{(ka)^3}{3}\left[1 + \frac{(ka)^2}{3} - \frac{(ka)^3}{3bK^2} + O(k^4)\right] \\ &= \frac{(ka)^3}{3} + \frac{(ka)^5}{9} + O(k^6) , \end{aligned}$$

và

$$\begin{aligned} \delta_2 &= \tan^{-1}(y + ka) - ka \\ &\approx y = O(k^3) . \end{aligned}$$

Vì thế đóng góp của các sóng riêng phần với $l = 2$ vào $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ cũng tỉ lệ với k^4. Điều này đúng với mọi ℓ khi $E \to 0$. Do vậy

$$\begin{aligned} \frac{\partial\sigma}{\partial\Omega} &= |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, e^{i\delta_l}\, \sin\, \delta_l P_l(\cos\theta)\right|^2 \\ &\xrightarrow[E \to 0]{} k^4 F(\cos\theta) \sim E^2 F(\cos\theta) , \end{aligned}$$

với số mũ của E là $\lambda = 2$. Luỹ thừa bậc cao nhất của $\cos\theta$ trong hàm phân bố góc cũng bằng 2 vì các sóng chủ yếu bao gồm các sóng riêng phần với $\ell = 0$ và $\ell = 1$.

6008

Thế dạng vỏ trong phương trình Schrödinger 3 chiều là

$$V(r) = \alpha\delta(r - r_0) .$$

(a) Tìm hàm sóng của trạng thái s ($l = 0$) có $E > 0$. Đưa ra biểu thức xác định độ dịch pha δ. Với $\hbar k = \sqrt{2mE}$ hãy chỉ ra rằng trong giới hạn $k \to 0$, $\delta \to Ak$, trong đó A là một hằng số (gọi là độ dài tán xạ). Biểu diễn A qua α và r_0.

(b) Có thể có bao nhiêu trạng thái liên kết với $l = 0$ và sự tồn tại của chúng phụ thuộc vào α như thế nào? (Có thể chứng minh bằng hình học)

(c) Độ dài tán xạ A bằng bao nhiêu nếu có một trạng thái liên kết khi $E = 0$? Mô tả sự biến thiên của A khi α thay đổi từ đẩy ($\alpha > 0$) thành hút và sau đó khi α trở nên đủ âm để có trạng thái liên kết. Khoảng biến thiên của A có khác so với khoảng biến thiên của α không? Vẽ đồ thị của A như là một hàm của α.

(*MIT*)

Lời giải:

(a) Phương trình Schrödinger cho phần hàm sóng xuyên tâm với $\ell = 0$ là

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\psi\right) + V(r)\,\psi = E\psi\,.$$

Với $\psi = \mu/r$, $V(r) = \alpha\delta(r - r_0)$ phương trình trên trở thành

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\mu'' + \alpha\delta(r - r_0)\,\mu = E\mu\,,$$

nghĩa là,

$$\mu'' - \beta\delta(r - r_0)\,\mu = -k^2\mu\,, \qquad (1)$$

trong đó

$$\beta = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\,, \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\,.$$

Nghiệm của phương trình thỏa mãn điều kiện $\mu = 0$ khi $r = 0$ và μ = hữu hạn khi $r \to \infty$ là

$$\mu = \begin{cases} \sin kr, & r < r_0, \\ a\sin(kr + \delta), & r > r_0\,. \end{cases}$$

Lấy tích phân phương trình (1) từ $r_0 - \varepsilon$ đến $r_0 + \varepsilon$ và cho $\varepsilon \to 0$ ta thu được

$$\mu'(r_0+) - \mu'(r_0-) = \beta\mu(r_0)\,.$$

Tính liên tục của μ tại $r = r_0$ và điều kiện trên dẫn đến

$$\begin{cases} \sin kr_0 = a\sin(kr_0+\delta)\,, \\ \dfrac{\beta}{k}\sin kr_0 = a\cos(kr_0+\delta) - \cos kr_0\,. \end{cases}$$

Vì thế

$$a^2[\sin^2(kr_0+\delta)+\cos^2(kr_0+\delta)] = a^2 = 1 + \frac{\beta}{k}\sin 2kr_0 + \frac{\beta^2}{k^2}\sin^2 kr_0\,,$$

$$\tan(kr_0+\delta) = \frac{\tan kr_0}{1+\dfrac{\beta}{k}\tan kr_0}\,, \qquad (2)$$

Đây là những phương trình xác định a và độ dịch pha δ. Trong trường hợp giới hạn $k \to 0$, phương trình trên trở thành

$$\frac{kr_0 + \tan\delta}{1 - kr_0\tan\delta} \approx \frac{kr_0}{1+\beta r_0}\,,$$

hay

$$\tan\delta \approx -\frac{\beta r_0^2}{1+\beta r_0}k\,,$$

nếu ta bỏ qua $O(k^2)$. Từ đây, khi $k \to 0$, ta có $\tan\delta \to 0$ nên

$$\delta \approx -\frac{r_0 k}{1+\dfrac{1}{\beta r_0}} = Ak\,,$$

trong đó

$$A = \frac{-r_0}{1+\dfrac{\hbar^2}{2m\alpha r_0}}$$

là độ dài tán xạ.

(b) Với trạng thái liên kết, $E < 0$ và phương trình (1) có thể được viết dưới dạng

$$\mu'' - \beta\delta(r-r_0)\,\mu = k^2\mu$$

với

$$\beta = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\,, \qquad k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,.$$

Nghiệm của phương trình thỏa mãn điều kiện $\mu = 0$ tại $r = 0$ và $\mu =$ hữu hạn khi $r \to \infty$ có dạng

$$\mu = \begin{cases} \sinh kr, & r < r_0, \\ ae^{-kr}, & r > r_0. \end{cases}$$

Điều kiện liên tục của hàm sóng, tương tự như trong phần (a), cho ta

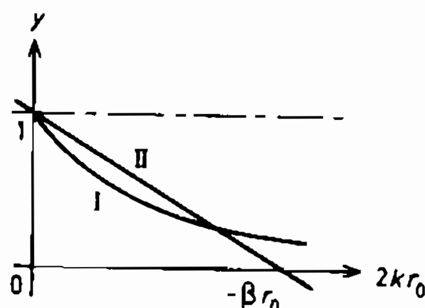
$$\mu = \begin{cases} \sinh kr_0 = ae^{-kr_0}, \\ \beta ae^{-kr_0} = -ake^{-kr_0} - k\cosh kr_0. \end{cases}$$

Khử a, ta thu được

$$(\beta + k)\sinh kr_0 = -k\cosh kr_0,$$

hay

$$e^{-2kr_0} = 1 + \frac{2kr_0}{\beta r_0}.$$



Hình 6.1

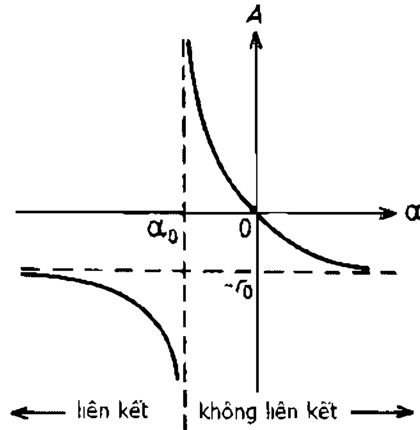
Với các trạng thái liên kết thì $E < 0$. Trong khoảng giữa $E = -\infty$ và $E = 0$, hoặc giữa $2kr_0 = \infty$ và $2kr_0 = 0$, có một giao điểm giữa các đường cong (I) $y = e^{-2kr_0}$ và (II) $y = 1 + \frac{2kr_0}{\beta r_0}$ nếu $-1 < \frac{1}{\beta r_0} < 0$, như được thể hiện trong Hình 6.1. Vì vậy nếu điều kiện này được thoả mãn sẽ có một trạng thái liên kết với $\ell = 0$. Điều kiện này đòi hỏi

$$-1 < \frac{-\hbar^2}{2m|\alpha|r_0}, \qquad \text{hay} \qquad \alpha < \frac{-\hbar^2}{2mr_0} = \alpha_0.$$

(c) Trong phần (a) ta đã tính được

$$A = -\frac{r_0}{1+\dfrac{1}{\beta r_0}} = -\frac{r_0}{1+\dfrac{\hbar^2}{2mr_0\alpha}}.$$

Sự biến thiên của A được thể hiện trong Hình 6.2, trong đó ta thấy rằng khi $\alpha = 0$, $A = 0$; khi $\alpha = \alpha_0 = \frac{-\hbar^2}{2mr_0}$, $A = \pm\infty$; $\alpha = \pm\infty$, $A = -r_0$. Với $E \to +0$, có một trạng thái liên kết xuất hiện khi $E = 0$. Với năng lượng này $\alpha - \alpha_0$, $\delta - \pm\pi/2$ và $A - \infty$.



Hình 6.2

6009

Hạt nhân ^{8}Be không bền vững với quá trình phân rã thành 2 hạt α, nhưng các thí nghiệm về phản ứng hạt nhân đã xác định hai mức năng lượng không bền thấp nhất là $J = 0$, trạng thái chẵn, ~ 95 keV trên mức phân rã và $J = 2$, trạng thái chẵn, ~ 3 MeV trên mức phân rã.

Xét xem sự tồn tại của các mức nói trên ảnh hưởng đến quá trình tán xạ của hạt α với khí hêli như thế nào, cụ thể hãy

(a) Viết hàm sóng cho quá trình tán xạ đàn tính, trong khai triển song riêng phần, khi $r \to \infty$.

(b) Mô tả định tính sự biến thiên của các độ dịch pha liên quan như các hàm của năng lượng trong lân cận của mỗi mức.

(c) Sự biến thiên này ảnh hưởng như thế nào đến phân bố góc của các hạt α.

(*Chicago*)

Lời giải:

(a) Spin của hạt α bằng 0, vì vậy hệ hai hạt α (các hạt đồng nhất) tuân theo thống kê Bose-Einstein và số lượng tử l của mômen xung lượng tương đối phải là một số chẵn. Có hai độ dịch pha có tính cộng được: δ_ℓ^C do tương tác Coulomb gây ra và δ_ℓ^N do lực hạt nhân. Vì thế khi $r \to \infty$, hàm sóng là

$$\psi = \sum_{l=0,2,4,\ldots} (2l+1)\, i^l \exp[i(\delta_l^C + \delta_l^N)]\,(kr)^{-1} \times \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l^C + \delta_l^N - \gamma \ln 2kr\right) P_l(\cos\theta)\,,$$

trong đó k là số sóng trong hệ quy chiếu khối tâm, $\gamma = (2e)^2/\hbar v_r$.

(b) Khi năng lượng tăng đến một giá trị nào đó, δ_ℓ^N cũng tăng lên từ giá trị 0 do tác dụng của lực hạt nhân. Cụ thể là khi năng lượng gần với một mức năng lượng không bền của hạt nhân tổng hợp với l xác định, tất cả các độ dịch pha δ_l^N gần giá trị π đều thay đổi rất nhanh. Đối với ^{8}Be, điều này xảy ra khi $l = 0$ với năng lượng xấp xỉ 95 keV, và khi $l = 2$ với năng lượng xấp xỉ 3 MeV.

Một cách tổng quát, nếu năng lượng thấp hơn thế năng Coulomb, có thể bỏ qua lực hạt nhân. Trong trường hợp đó độ dịch pha δ_l^N gần bằng 0 hay $n\pi$.

(c) Để thấy được ảnh hưởng của lực hạt nhân lên phân bố góc, ta viết lại khai triển sóng riêng phần như sau

$$\psi = \sum_{l=0,2,4,\ldots}^{\infty} (2l+1)\, i^l \exp(i\delta_l^C)\,(kr)^{-1} \left\{ \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} - \gamma \ln 2kr + \delta_l^C\right) + \left(\frac{\exp(2i\delta_l^N) - 1}{2i}\right) \exp\left[i\left(kr - \frac{l\pi}{2} - \gamma \ln 2kr + \delta_l^C\right)\right]\right\} P_l(\cos\theta)\,,$$

trong đó số hạng thứ nhất trong dấu ngoặc lớn là hàm sóng tán xạ Coulomb, không bị ảnh hưởng bởi lực hạt nhân. Ta lấy tổng của số hạng này theo các

giá trị của ℓ và thu được

$$\exp i\{kr\cos\theta - \gamma\ln[kr(1-\cos\theta)] + \delta_o^C\} - \gamma(kr)^{-1}$$
$$\times \exp i\{kr\cos\theta - \gamma\ln(kr) + \delta_o^C\}$$
$$\times\sqrt{\frac{1}{2}}\left\{\frac{\exp[-i\gamma\ln(1-\cos\theta)]}{1-\cos\theta} + \frac{\exp[-i\gamma\ln(1+\cos\theta)]}{1+\cos\theta}\right\}.$$

Hai số hạng trong dấu ngoặc lớn trên đây xuất hiện do tính đồng nhất của hai hạt nhân He^{++}. Điều này nói chung không xảy ra trong tán xạ Rutheford. Số hạng thứ hai trong trong dấu ngoặc lớn trong khai triển của ψ là do lực hạt nhân cản trở tán xạ Coulomb. Nhưng hiệu ứng này rất nhỏ khi δ_l^N xấp xỉ $n\pi$.

6010

Xét bài toán tán xạ trong cơ học lượng tử có cả kênh tán xạ không đàn tính. Giả sử ta có thể viết khai triển sóng riêng phần của biên độ tán xạ cho kênh tán xạ đàn tính dưới dạng

$$f(k,\theta) = \sum_{l-0}^{\infty}(2l+1)\frac{\eta_l e^{2i\delta_l}-1}{2ik}P_l(\cos\theta),$$

trong đó $\delta_l(k)$ and $\eta_l(k)$ là các đại lượng thực với $0 \leq \eta_l \leq 1$, số sóng được kí hiệu là k, còn θ là góc tán xạ. Với một sóng riêng phần cho trước, hãy tìm giới hạn dưới và giới hạn trên cho tiết diện tán xạ đàn tính $\sigma^{(l)}_{\text{đàn tính}}$ biểu diễn qua tiết diện tán xạ không đàn tính $\sigma^{(l)}_{\text{không đàn tính}}$.

(*Chicago*)

Lời giải:

Vì

$$\sigma^{(l)}_{\text{đàn tính}} = \pi\,\lambda\!\!\!^{-2}(2l+1)\,|1-\eta_l e^{2i\delta_l}|^2,$$
$$\sigma^{(l)}_{\text{không đàn tính}} = \pi\,\lambda\!\!\!^{-2}(2l+1)\,(1-|\eta_l e^{2i\delta_l}|^2),$$

trong đó

$$\lambda\!\!\!^{-2} = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{k},$$

nên ta có

$$\sigma^{(l)}_{\text{đàn tính}} = \frac{|1-\eta_l e^{2i\delta_l}|^2}{1-|\eta_l e^{2i\delta_\ell}|^2}\cdot\sigma^{(l)}_{\text{không đàn tính}}.$$

Vì η_l, δ_l là các số thực và $0 \le \eta_l \le 1$, ta thu được

$$\frac{(1-\eta_l)^2}{1-\eta_l^2} \le \frac{|1-\eta_l e^{2i\delta_l}|^2}{1-|\eta_l e^{2i\delta_l}|^2} \le \frac{(1+\eta_l)^2}{1-\eta_l^2}\,.$$

hay là

$$\frac{(1-\eta_l)^2}{1-\eta_l^2}\,\sigma^{(l)}_{\text{không đàn tính}} \le \sigma^{(l)}_{\text{đàn tính}} \le \frac{(1+\eta_l)^2}{1-\eta_l^2}\,\sigma^{(l)}_{\text{không đàn tính}}\,.$$

Vậy là giới hạn trên và giới hạn dưới của $\sigma^{(l)}_{\text{đàn tính}}$ tương ứng là

$$\frac{(1+\eta_l)^2}{1-\eta_l^2}\,\sigma^{(l)}_{\text{không đàn tính}} \quad \text{và} \quad \frac{(1-\eta_l)^2}{1-\eta_l^2}\,\sigma^{(l)}_{\text{không đàn tính}}\,.$$

6011

Một electron chậm với số sóng k bị tán xạ bởi một nguyên tử trung hoà với bán kính hiệu dụng (lớn nhất) R, sao cho $kR \ll 1$.

(a) Giả thiết rằng thế tương tác electron – nguyên tử đã biết, hãy giải thích độ dịch pha δ liên hệ như thế nào với nghiệm của phương trình Schrödinger.

(b) Đưa ra biểu thức cho tiết diện tán xạ vi phân theo δ và k. (Nếu không nhớ công thức, hãy cố gắng suy đoán dựa vào lập luận về thứ nguyên).

(c) Dựa vào đồ thị của nghiệm phương trình Schrödinger, hãy giải thích tại sao một thế hút đơn thuần và không bao giờ bằng 0 lại có thể không gây ra tán xạ đối với một giá trị nào đó của k.

(d) Vẫn dựa vào giản đồ, hãy giải thích tại sao một thế hút trong khoảng cách ngắn và là thế đẩy ở khoảng cách lớn lại có thể gây ra tán xạ cộng hưởng gần một giá trị k xác định.

(e) Giá trị cực đại của tiết diện tán xạ toàn phần ở tâm của cộng hưởng là bao nhiêu?

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Ta chỉ cần xét sóng riêng phần s khi $kR \ll 1$. Nghiệm của phương trình Schrödinger có dạng tiệm cận khi $r \to \infty$ như sau

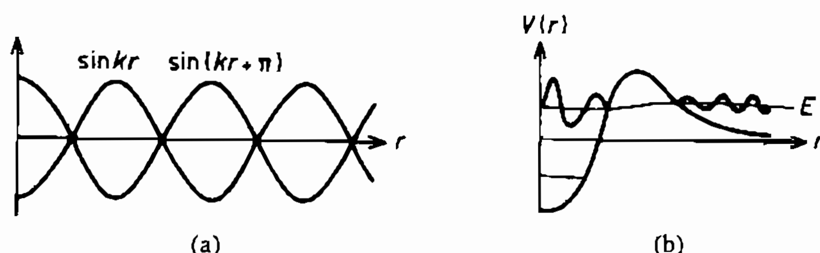
$$\psi(r) \to \frac{\sin(kr+\delta)}{kr}\,.$$

Độ dịch pha δ do vậy có mối liên hệ với nghiệm của phương trình Schrödinger.

(b) Tiết diện tán xạ vi phân được cho bởi công thức

$$\sigma(\theta) = \frac{\sin^2 \delta}{k^2} .$$

(c) Độ dịch pha δ trong trường hợp tổng quát là một hàm của số sóng k. Khi $\delta = n\pi$, $\sigma(\theta) = 0$, $\delta_t = 0$ không có tán xạ xảy ra. Nghiệm tiệm cận của phương trình Schrödinger với $\ell = 0$ được thể hiện trên Hình 6.3(a)



Hình 6.3

(d) Xét hố thế có dạng như trong Hình 6.3(b). Nếu năng lượng của hạt tới xấp xỉ một trị riêng của hố thế (trạng thái liên kết), hàm sóng của hạt bên trong hố thế sẽ liên kết chặt chẽ với hàm sóng ở bên ngoài hố thế và hàm sóng trong hố thế sẽ có biên độ lớn, dẫn đến tán xạ cộng hưởng.

(e) Giá trị lớn nhất của tiết diện tán xạ toàn phần ở tâm của đỉnh cộng hưởng là $4\pi R^2$, trong đó R là bán kính tác dụng của lực tương tác.

6012

Với một hố thế hút chữ nhật ($V = -V_0$, $r < a$; $V = 0, r > a$) hãy tìm "phương trình tương thích" ứng với một giá trị năng lượng dương để xác định sự phụ thuộc vào năng lượng của độ dịch pha δ_0 với $\ell = 0$. Từ đó, chỉ ra rằng với năng lượng cao, $\delta(k) \to \frac{maV_0}{\hbar^2 k}$, đồng thời thu lại kết quả này trong gần đúng Born.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Đặt $\chi = rR$. Với sóng riêng phần $\ell = 0$, phương trình Schrödinger trở

thành

$$\chi'' + k'^2\chi = 0\,, \quad k'^2 = k^2\left(1 + \frac{V_0}{E}\right), \quad r < a\,,$$

$$\chi'' + k^2\chi = 0\,, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}\,, \qquad r > a\,.$$

Nghiệm của phương trình này là

$$\chi = \begin{cases} \sin(k'r) & r < a\,, \\ A\sin(kr + \delta_0)\,, & r > a\,. \end{cases}$$

Điều kiện liên tục

$$(\ln\chi)'|_{r=a^-} = (\ln\chi)'|_{r=a^+}$$

cho ta một phương trình để xác định δ_0

$$k'\tan(ka + \delta_0) = k\tan(k'a)\,.$$

Vì

$$k'^2 = k^2\left(1 + \frac{V_0}{E}\right) \qquad \text{và} \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}\,,$$

khi $k \to \infty$, $k' \to k$. Do đó

$$\delta_0 = \arctan\left[\frac{k}{k'}\tan(k'a)\right] - ka \to (k' - k)\,a \quad \text{khi} \quad k \to \infty\,.$$

Vì thế khi cho $k \to \infty$ ta được

$$\delta_0 \to \left(\frac{k'^2 - k^2}{k' + k}\right) a \approx \frac{kV_0}{2E}\,a = \frac{maV_0}{\hbar^2 k}\,.$$

Biểu thức của độ dịch pha với $l = 0$ trong gần đúng Born là

$$\delta_0 \approx -\frac{2mk}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\,j_0^2(kr)\,r^2\,dr = \frac{2mkV_0}{\hbar^2}\int_0^a \frac{\sin^2 kr}{k^2}\,dr$$

$$= \frac{mV_0}{\hbar^2 k^2}\left[ka - \frac{1}{2}\sin(2ka)\right],$$

Từ đây ta có

$$\delta_0 \to \frac{mV_0 a}{\hbar^2 k}$$

khi $k \to \infty$, điều này hoàn toàn phù hợp với kết quả tính toán với sóng riêng phần ở trên.

6013

Tính tiết diện tán xạ của một hạt năng lượng thấp lên một thế cho bởi $V = -V_0$ với $r < a$, $V = 0$ với $r > a$. So sánh với kết quả thu được trong gần đúng Born.

(*Columbia*)

Lời giải:

Phương trình Schrödinger cho hàm sóng xuyên tâm có thể viết dưới dạng

$$\chi_l''(r) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l(r) = 0, \quad r > a,$$
$$\chi_l''(r) + \left[k'^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l(r) = 0, \quad r < a,$$

trong đó $\chi = rR(r)$,

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \qquad k'^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}.$$

Sóng riêng phần s cho đóng góp chủ yếu trong quá trình tán xạ ở năng lượng thấp. Vì thế, với $\ell = 0$ phương trình trên trở thành

$$\chi_l''(r) + k^2\chi_l(r) = 0, \quad r > a,$$
$$\chi_l''(r) + k'^2\chi_l(r) = 0, \quad r < a,$$

Nghiệm của nó là

$$\chi_l(r) = \begin{cases} A\sin(k'r), & r < a, \\ \sin(kr + \delta_0), & r > a. \end{cases}$$

Điều kiện liên tục của hàm sóng $(\ln\chi_l)'|_{r=a^-} = (\ln\chi_l)'|_{r=a^+}$ cho ta

$$k\tan(k'a) = k'\tan(ka + \delta_0),$$

hay

$$\delta_0 = \arctan\left[\frac{k}{k'}\tan(k'a)\right] - ka.$$

Tại vùng năng lượng thấp

$$k \to 0, k' \to k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}},$$

biểu thức trên trở thành

$$\delta_0 \approx ka\left[\frac{\tan(k_0a)}{k_0a} - 1\right].$$

Do vậy, tiết diện tán xạ toàn phần là

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 \approx \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2 = 4\pi a^2\left[\frac{\tan(k_0a)}{k_0a} - 1\right]^2.$$

Nếu $k_0a \ll 1$,

$$\sigma \approx 4\pi a^2\left[\frac{k_0a}{k_0a} + \frac{(k_0a)^3}{3k_0a} - 1\right]^2 = \frac{16\pi a^6 m^2 V_0^2}{9\hbar^4}.$$

Trong gần đúng Born,

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,V(r)\,e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\,d^3r,$$

trong đó $\mathbf{k}'$, $\mathbf{k}$ tương ứng là các vectơ sóng tới và sóng tán xạ. Đặt $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$, với $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$ đối với tán xạ đàn tính. Khi đó $q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$, trong đó θ là góc tán xạ. Ta thu được

$$\begin{aligned}
f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\,r^2\,dr\int_0^\pi e^{-iqr\cos\theta'}\,2\pi\sin\theta'\,d\theta' \\
&= -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\,\frac{\sin(qr)}{qr}\,r^2\,dr = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\int_0^a r\sin(qr)\,dr \\
&= \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3}\left[\sin(qa) - qa\cos(qa)\right].
\end{aligned}$$

Do đó,

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4 q^6}\left[\sin(qa) - qa\cos(qa)\right]^2.$$

Với năng lượng thấp $k \to 0$, $q \to 0$,

$$\sin(qa) \approx qa - \frac{1}{3!}(qa)^3, \qquad \cos(qa) \approx 1 - \frac{1}{2!}(qa)^2,$$

cho nên

$$\sigma(\theta) \approx \frac{4m^2V_0^2a^6}{9\hbar^4}.$$

Vậy tiết diện tán xạ toàn phần đối với tán xạ ở năng lượng thấp là

$$\sigma = \int \sigma(\theta)\, d\Omega = \frac{16\pi m^2V_0^2a^6}{9\hbar^4}.$$

Vì thế ở năng lượng thấp khi $k \to 0$, $ka \ll 1$, hai phương pháp cho kết quả như nhau.

6014

Trong quá trình tán xạ trên một thế $V(r)$, hàm sóng có thể được viết dưới dạng một sóng phẳng đi tới cộng với một sóng tán xạ đi ra $\psi = e^{ikz} + v(r)$. Hãy dẫn ra phương trình vi phân cho $v(r)$ trong gần đúng Born bậc nhất.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Có hai cách giải bài toán này.

Cách 1:

Với một hạt khối lượng m trong trường thế xuyên tâm $V(r)$, phương trình Schrödinger có thể viết dưới dạng

$$(\nabla^2 + k^2)\,\psi = U\psi,$$

trong đó

$$U = \frac{2m}{\hbar^2}V, \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Định nghĩa hàm Green $G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ như sau

$$(\nabla^2 + k^2)\,G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$

Hàm thoả mãn phương trình này là

$$G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|},$$

và hàm thoả mãn phương trình Schrödinger có dạng

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\, U(\mathbf{r}')\, \psi(\mathbf{r}')\, d^3\mathbf{r}' .$$

Vì sóng tới là sóng phẳng $e^{ikz'}$, ta thay $U(\mathbf{r}')\,\psi(\mathbf{r}')$ bằng $U(\mathbf{r}')\,e^{ikz'}$ trong gần đúng Born bậc nhất

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\, U(\mathbf{r}')\, e^{ikz'}\, d^3\mathbf{r}' .$$

Vì vậy, sóng tán xạ là

$$v(r) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\, U(\mathbf{r}')\, e^{ikz'}\, d^3\mathbf{r}' .$$

Tác dụng toán tử $(\nabla^2 + k^2)$ lên cả hai vế của phương trình trên, ta thu được

$$\begin{aligned}(\nabla^2 + k^2)\,\mathbf{v}(r) &= -\frac{1}{4\pi} \int (\nabla^2 + k^2)\, \frac{\exp(ik(\mathbf{r} - \mathbf{r}'))}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\, U(r')\, e^{ikz'} d^3 r' \\ &= \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\, U(r')\, e^{ikz'}\, d^3 r' = U(r)\, e^{ikz} .\end{aligned}$$

Vậy phương trình vi phân cho $v(r)$ là

$$(\nabla^2 + k^2)\, v(r) = U(r)\, e^{ikz} .$$

Cách 2:

Viết phương trình Schrödinger cho hàm sóng xuyên tâm dưới dạng

$$(\nabla^2 + k^2)\,\psi = U\psi ,$$

trong đó

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},\ U = \frac{2m}{\hbar^2} V,$$

Thay $\psi = e^{ikz} + v(r)$ vào phương trình trên, ta được

$$(\nabla^2 + k^2)\, e^{ikz} + (\nabla^2 + k^2)\, v(r) = U[e^{ikz} + v(r)] ,$$

hay

$$(\nabla^2 + k^2)\, v(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V[e^{ikz} + v(r)] ,$$

bởi vì $(\nabla^2 + k^2)\,e^{ikz} = 0$. Trong gần đúng Born bậc nhất, $e^{ikz} + v(r) \approx e^{ikz}$, vì thế phương trình vi phân cho $v(r)$ là

$$(\nabla^2 + k^2)\,v\,(r) \approx \frac{2m}{\hbar^2} V e^{ikz} .$$

6015

Trong lý thuyết tán xạ lượng tử trên một thế đã cho, ta có biểu thức sau cho dạng tiệm cận của hàm sóng

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow[r\to\infty]{} e^{ikz} + f(\theta, \varphi)\,\frac{e^{ikr}}{r} .$$

(a) Giả sử Hamiltonian bất biến đối với phép quay, hãy đưa ra những lập luận để thấy rằng biên độ tán xạ f không phụ thuộc vào góc φ.

(b) Tại sao lập luận này không thể được mở rộng (xét phép quay quanh trục bất kì) để đi đến kết luận f cũng không phụ thuộc cả vào θ?

(c) Xem xét lại phần (b) trong trường hợp năng lượng của hạt tới tiến đến 0.

(d) Tìm biểu thức biểu diễn tiết diện tán xạ qua f?

(e) Tìm biểu thức của f trong gần đúng Born bậc nhất (hãy giải thích mọi đại lượng được đưa ra và không cần quan tâm tới các thừa số không thứ nguyên như 2 hay π).

(f) Với điều kiện nào gần đúng Born áp dụng tốt?

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Sóng tới $e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta}$ là hàm riêng của toán tử $\hat{l}_z$, thành phần hướng theo trục z của mômen góc $\mathbf{L}$, với trị riêng $m = 0$. Nếu Hamiltonian bất biến đối với phép quay, mômen xung lượng được bảo toàn và sóng ra vẫn là hàm riêng của $\hat{l}_z$ với trị riêng $m = 0$, nghĩa là,

$$\hat{l}_z f(\theta, \varphi) = m f(\theta, \varphi) = 0 .$$

Vì $\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$, điều này có nghĩa là $\partial f(\theta, \varphi)/\partial\varphi = 0$.

(b) Vì dạng tiệm cận của hàm sóng $\psi(\mathbf{r})$ không phải là hàm riêng của $\hat{L}^2$, ta không thể mở rộng lập luận trên để kết luận f không phụ thuộc vào θ.

(c) Khi năng lượng $E \to 0$, nghĩa là, $k \to 0$, sóng tới chủ yếu chỉ bao gồm sóng riêng phần với $l = 0$; các sóng riêng phần khác có biên độ rất nhỏ và có thể bỏ qua. Với những điều kiện như vậy, tính bất biến đối với phép quay của Hamiltonian dẫn đến $\hat{L}^2$ bảo toàn. Khi đó sóng đi ra cũng phải là hàm riêng của toán tử $\hat{L}^2$ với trị riêng $l = 0$ (một cách gần đúng). Vì

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right],$$

ta có

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right] = 0.$$

Bởi vì $f(\theta)$ phải là một hàm sóng với tất cả những tính chất cần thiết, nên

$$df(\theta)/d\theta = 0.$$

(d) Tiết diện tán xạ vi phân được cho bởi công thức

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta,\varphi)|^2.$$

(e) Trong gần đúng Born bậc nhất, với quá trình tán xạ trong một trường xuyên tâm $V(r')$, f được cho bởi

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(r')\exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}')\,d^3r'$$
$$= -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r'V(r')\sin(qr')\,dr',$$

trong đó $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}$ và $\mathbf{k}_0$ tương ứng là xung lượng của hạt trước và sau tán xạ.

(f) Để gần đúng Born áp dụng tốt thì thế tương tác phải nhỏ so với năng lượng hạt tới.

6016

Xét một hạt có khối lượng m chuyển động một chiều và tán xạ trên thế $V(x)$.

(a) Chứng tỏ rằng

$$G_E(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\frac{e^{ikx}}{E - \dfrac{\hbar^2k^2}{2m} + i\varepsilon},$$

với ε là một số dương vô cùng nhỏ, $G_E(x)$ là hàm Green của hạt tự do đối với phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian với năng lượng E và các điều kiện biên của sóng đi ra.

(b) Viết phương trình tích phân cho hàm riêng với năng lượng tương ứng với một sóng tới truyền theo chiều dương trục x. Sử dụng phương trình này để tính xác suất phản xạ trong gần đúng Born bậc nhất với thế

$$V(x) = \begin{cases} V_0 , & |x| < a/2 , \\ 0 , & |x| > a/2 . \end{cases}$$

Với giá trị nào của E thì gần đúng này áp dụng tốt?

(Buffalo)

Lời giải:

(a) Để giải phương trình Schrödinger một chiều không phụ thuộc thời gian

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + E \right) \psi = V\psi ,$$

ta định nghĩa hàm Green $G_E(x)$ thỏa mãn phương trình sau

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + E \right) G_E(x) = \delta(x) .$$

Biểu diễn $G_E(x)$ và $\delta(x)$ qua các tích phân Fourier

$$G_E(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(k)\, e^{ikx}\, dk ,$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\, dk$$

rồi thay vào phương trình đối với $G_E(x)$, ta thu được

$$\left(-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E \right) f(k) = 1 ,$$

hay

$$f(k) = \frac{1}{E - \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}} .$$

Vì điểm kì dị của $f(k)$ nằm trên đường lấy tích phân và tích phân Fourier có thể coi như một tích phân lấy trong mặt k phức, ta có thể thêm $i\varepsilon$, trong đó ε là một số dương nhỏ, vào mẫu số của $f(k)$. Sau khi lấy tích phân, ta lại cho $\varepsilon \to 0$. Xét

$$G_E(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ikx}}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + i\varepsilon} .$$

Tích phân có kì dị khi

$$(E + i\varepsilon) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 0 ,$$

nghĩa là tại

$$k = \pm k_1 ,$$

trong đó

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(E + i\varepsilon)}}{\hbar} .$$

Khi $x > 0$, tích phân trở thành một tích phân theo đường cong kín trên nửa mặt phẳng trên với một điểm kì dị tại k_1 với thặng dư

$$a_1 = -\frac{me^{ik_1 x}}{\pi \hbar^2 k_1} .$$

Công thức tích phân Cauchy cho ta

$$G_E(x) = 2\pi i a_1 = -i \frac{m}{\hbar^2 k_1} e^{ik_1 x} \qquad (x > 0) .$$

Khi

$$\varepsilon \to 0, \qquad k_1 \to \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} .$$

Đây là giá trị của k_1 sẽ được sử dụng trong biểu thức của $G_E(x)$. Tương tự, khi $x < 0$, ta có thể lấy tích phân theo một đường cong kín trên nửa mặt phẳng dưới và thu được

$$G_E(x) = -i \frac{m}{\hbar^2 k_1} e^{-ik_1 x} \qquad (x < 0) .$$

Ở đây ta cũng có $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Vì thế hàm Green của hạt tự do $G_E(x)$ biểu diễn sóng ra với cả $x > 0$ lẫn $x < 0$.

(b) Nghiệm của phương trình Schrödinger dừng thoả mãn phương trình tích phân

$$\psi_E(x) = \psi^0(\mathbf{x}) + G_E(x) * [V(x)\,\psi_E(x)]$$
$$= \psi^0(x) + \int_{-\infty}^{\infty} G_E(x-\xi)\,V(\xi)\,\psi_E(\xi)\,d\xi\,,$$

trong đó $\psi^0(x)$ là nghiệm của phương trình

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + E\right)\psi(x) = 0\,.$$

Trong gần đúng Born bậc nhất ta thay ψ_0 và ψ_E trong vế phải của phương trình tích phân bằng hàm sóng tới và thu được

$$\psi_E(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} G_E(x-\xi)\,V(\xi)\,e^{ik\xi}\,d\xi = e^{ikx}$$
$$+ \int_{-\infty}^{x} (-i)\,\frac{m}{\hbar^2 k}\,e^{ik(x-\xi)}\,V(\xi)\,e^{ik\xi}\,d\xi$$
$$+ \int_{x}^{\infty} (-i)\,\frac{m}{\hbar^2 k}\,e^{-ik(x-\xi)}\,V(\xi)\,e^{ik\xi}\,d\xi\,.$$

Trong trường hợp phản xạ ta cần biết $\psi_E(x)$ khi $x \to -\infty$. Với $x \to -\infty$, ta có

$$\int_{-\infty}^{x} (-i)\,\frac{m}{\hbar^2 k}\,e^{ik(x-\xi)}\,V(\xi)\,e^{ik\xi}\,d\xi = 0\,,$$

$$\int_{x}^{\infty} (-i)\,\frac{m}{\hbar^2 k}\,e^{-ikx}\,e^{2ik\xi}\,V(\xi)\,d\xi = \int_{-a/2}^{a/2} (-i)\,\frac{m}{\hbar^2 k}\,e^{-ikx}\,V_0\,e^{2ik\xi}\,d\xi$$
$$= -i\,\frac{mV_0}{\hbar^2 k^2}\,\sin(ka)\,e^{-ikx}\,.$$

Vì thế xác suất phản xạ là

$$R = |\psi_E(-\infty)|^2/|\psi_0|^2 = \frac{m^2 V_0^2}{\hbar^4 k^4}\,\sin^2 ka\,.$$

Khi năng lượng lớn,

$$\left|\int_{-\infty}^{\infty} G_E(x-\xi)\,V(\xi)\,e^{ik\xi}\,d\xi\right| \ll |e^{ikx}|\,,$$

và việc thay $\psi(x)$ bằng e^{ikx} sẽ là một gần đúng tốt.

6017

Tính tiết diện tán xạ vi phân và toàn phần trong gần đúng Born khi một hạt khối lượng m tán xạ trên thế δ: $V(\mathbf{r}) = g\delta^3(\mathbf{r})$.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Trong gần đúng Born,

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}V(r')e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}\,d\mathbf{r}'\,.$$

trong đó $\mathbf{k}$ và $\mathbf{k}'$ tương ứng là vectơ sóng tới và sóng phản xạ. Đặt $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$. Khi đó

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}g\int \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}')\,\delta(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}' = \frac{mg}{2\pi\hbar^2}\exp(-i0q) = \frac{mg}{2\pi\hbar^2}\,,$$

và tiết diện tán xạ vi phân là

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{m^2g^2}{4\pi^2\hbar^4}\,.$$

Vì phân bố là đẳng hướng, tiết diện tán xạ toàn phần bằng

$$\sigma_t = 4\pi\sigma = \frac{m^2g^2}{\pi\hbar^4}\,.$$

6018

Xét một hạt có khối lượng m, năng lượng E tán xạ trên một thế đối xứng cầu $B\delta(r-a)$, trong đó B và a là các hằng số.

(a) Trong trường hợp tán xạ với năng lượng rất cao (nhưng vẫn là phi tương đối tính), hãy dùng gần đúng Born để tính tiết diện tán xạ vi phân.

(b) Tính tiết diện tán xạ vi phân cho trường hợp tán xạ với năng lượng rất thấp ($\lambda > a$)? Chú ý: Trong phần (b), có thể thấy các tính toán có phần hơi dài dòng. Tuy nhiên hãy giải bài toán đến một mức độ đủ để phần còn lại của

lời giải chỉ gồm các tính toán đại số tương đối đơn giản.

(*Princeton*)

Lời giải:

(a) Như đã chỉ ra trong **Bài tập 6013**,

$$\begin{aligned} f &= -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty r^2\,\frac{\sin qr}{qr}\,B\delta(r-a)\,dr \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2 q}\frac{\sin qa}{}\,Ba\,. \end{aligned}$$

Vì vậy, tiết diện tán xạ vi phân là

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = \left(\frac{2m\sin qa}{\hbar^2 q}\,Ba\right)^2 .$$

(b) Với năng lượng thấp chỉ có sóng riêng phần với $l = 0$ đóng vai trò quan trọng. Nếu đặt hàm sóng xuyên tâm là $R(x) = \chi(r)/r$, thì $\chi(r)$ sẽ thoả mãn phương trình

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\,[E - B\delta(r-a)]\,\chi = 0\,.$$

Nghiệm của phương trình trên là

$$\begin{cases} \chi = A\sin(kr)\,, & r < a\,, \\ \chi = \sin(kr + \delta_0)\,, & r > a\,, \end{cases}$$

trong đó

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\,.$$

Từ tính chất liên tục của hàm sóng $\chi(r)$ tại $r = a$, ta có

$$\chi(a+0) = \chi(a-0)\,.$$

Lấy tích phân phương trình sóng đối với χ từ $a - \varepsilon$ đến $a + \varepsilon$, trong đó ε là một số dương nhỏ, sau đó cho $\varepsilon \to 0$, ta thu được

$$\chi'(a+0) - \chi'(a-0) - \frac{2m}{\hbar^2}\,B\chi(a) = 0\,.$$

Hai điều kiện trên dẫn tới

$$\frac{k}{\tan(ka+\delta_0)} = \frac{2m}{\hbar^2}B + \frac{k}{\tan(ka)}.$$

Khi $E \to 0$, $k \to 0$ và

$$\tan(ka) \to ka,\ \tan(ka+\delta_0) = \frac{\tan(ka) + \tan\delta_0}{1-\tan(ka)\,\tan\delta_0} \to \frac{ka+\delta_0}{1-ka\delta_0}.$$

Thay vào phương trình trên ta thu được

$$\delta_0 \approx \frac{k}{\frac{2m}{\hbar^2}B + \frac{1}{a}}.$$

Vì thế

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2}\,|\,e^{i\delta_0}\sin\delta_0\,|^2 \approx \left(\frac{1}{\frac{2m}{\hbar^2}B+\frac{1}{a}}\right)^2.$$

Bởi vì biểu thức trên không phụ thuộc tường minh vào góc nên tán xạ là đẳng hướng.

6019

Một nucleon tán xạ đàn tính trên một hạt nhân nặng. Tác dụng của hạt nhân nặng có thể được biểu diễn dưới dạng một thế cố định

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < R; \\ 0, & r > R, \end{cases}$$

trong đó V_0 là một hằng số dương. Hãy tính tiết diện tán xạ vi phân tới bậc thấp nhất của V_0.

(Berkeley)

Lời giải:

Kí hiệu μ là khối lượng rút gọn của nucleon và hạt nhân, $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ trong đó $\mathbf{k}'$, $\mathbf{k}$ lần lượt là vectơ sóng của nucleon trước và sau tán xạ. Trong gần

đúng Born, như trong **Bài tập 6013**, ta có

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{4\mu^2}{\hbar^4 q^2} \left| \int_0^\infty r' V(r') \sin qr' \, dr' \right|^2$$
$$= \frac{4\mu^2 V_0^2}{\hbar^4 q^6} (\sin qR - qR \cos qR)^2 ,$$

trong đó $q = 2k \sin(\theta/2)$, $k = |\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$.

6020

Một hạt có khối lượng m, điện tích e, xung lượng p tán xạ trong một thế tĩnh điện gây ra bởi một phân bố điện tích có đối xứng cầu. Cho $\int r^2 \rho \, d^3x = A$, $\rho(r)\, d^3x$ là điện tích trong một thể tích nguyên tố d^3x. Giả thiết rằng ρ giảm rất nhanh đến 0 khi $r \to \infty$ và $\int \rho \, d^3x = 0$; tính trong gần đúng Born bậc nhất tiết diện tán xạ vi phân đối với tán xạ về phía trước. (Nghĩa là tìm $\frac{d\sigma}{d\Omega}|_{\theta=0}$, trong đó θ là góc tán xạ.)

(*Princeton*)

Lời giải:

Trong gần đúng Born bậc nhất, ta có

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2 e^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int U(r) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \, d^3x \right|^2 ,$$

trong đó

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}', \; q = 2k \sin\frac{\theta}{2} = \frac{2p}{\hbar} \sin\frac{\theta}{2},$$

$\mathbf{k}'$ và $\mathbf{k}$ là các vectơ sóng của hạt trước và sau tán xạ, $U(r)$ là thế tĩnh điện Coulomb thoả mãn phương trình Poisson

$$\nabla^2 U = -4\pi\rho(r) .$$

Kí hiệu

$$F(q) = \int \rho(r) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \, d^3x ,$$

trong đó $F(q)$ là ảnh Fourier của $\rho(r)$. Sử dụng phương trình Poisson ta có

$$\int U(r) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \, d^3x = \frac{2\pi}{q^2} F(q) .$$

Do đó

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2e^2}{4\pi^2\hbar^4} \cdot \frac{(4\pi)^2}{q^4} |F(q)|^2 = \frac{4m^2e^2}{\hbar^4 q^4} |F(q)|^2 .$$

Với tán xạ về phía trước, θ nhỏ và vì vậy q cũng nhỏ. Cho nên

$$\begin{aligned} F(q) &= \int \rho(r) \exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})\, d^3x \\ &= \int \rho(r) \left[1 + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + \frac{1}{2!}(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})^2 + \cdots\right] d^3x \\ &= \int \rho(r)\, d^3\mathbf{x} - \frac{1}{2!}\int \rho(r)\,(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})^2 d^3x + \cdots \\ &\approx -\frac{1}{6}q^2 \int \rho(r)\, r^2 d^3x = -\frac{Aq^2}{6}, \end{aligned}$$

vì khi $\int \rho d^3x = 0$, $\int_0^\pi \cos^{2n+1}\theta \cdot \sin\theta\, d\theta = 0$, số hạng bậc thấp nhất khi $\theta \to 0$ là

$$\frac{1}{2!}\int \rho(r)\,(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})^2\, d^3x \approx -\frac{q^2}{6}\int \rho(r)\, r^2\, d^3x .$$

Vậy

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\theta=0} = \frac{A^2m^2e^2}{9\hbar^4} .$$

6021

Sử dụng gần đúng Born để tính, chính xác đến một thừa số nhân, tiết diện tán xạ vi phân cho một hạt có khối lượng m chuyển động trong một thế đẩy

$$V = Ae^{-r^2/a^2} .$$

(*Berkeley*)

Lời giải:

Trong gần đúng Born ta có (**Bài tập 6013**)

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty rV(r)\,\sin(qr)\,dr .$$

trong đó $q = 2k\sin(\theta/2)$, $\hbar k$ là xung lượng của hạt tới. Vì rằng

$$
\begin{aligned}
f(\theta) &= -\frac{2mA}{\hbar^2 q}\int_0^{\infty} re^{-r^2/a^2}\sin(qr)\,dr = -\frac{mA}{\hbar^2 q}\int_{-\infty}^{\infty} re^{-r^2/a^2}\sin(qr)\,dr \\
&= \frac{mAa^2}{2\hbar^2 q}\int_{-\infty}^{\infty}(e^{-r^2/a^2})'\sin(qr)\,dr = -\frac{mAa^2}{2\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-r^2/a^2}\cos(qr)\,dr \\
&= -\frac{mAa^3}{2\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(r/a)^2}\cos\left(qa\frac{r}{a}\right)d\left(\frac{r}{a}\right) \\
&= -\frac{mAa^3}{2\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-r^2}\cos(qar)\,dr \\
&= -\frac{mAa^3}{4\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\exp\left[-\left(r-\frac{iqa}{2}\right)^2\right]\right. \\
&\quad \left. + \exp\left[-\left(r+\frac{iqa}{2}\right)^2\right]\right\} e^{-q^2a^2/4}\,dr \\
&= -\frac{mAa^3}{2\hbar^2}\sqrt{\pi}\, e^{-q^2a^2/4},
\end{aligned}
$$

nên tiết diện tán xạ vi phân bằng

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{m^2A^2a^6}{4\hbar^4}\pi e^{-q^2a^2/2}.$$

6022

Một hạt phi tương đối tính tán xạ trên một hố thế chữ nhật

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < R, \quad (V_0 > 0) \\ 0, & r > R. \end{cases}$$

(a) Giả sử năng lượng của hạt trước khi tán xạ đủ lớn, hãy tính tiết diện tán xạ trong gần đúng Born bậc nhất (không cần phải chuẩn hoá) và vẽ dạng phân bố góc.

(b) Kết quả này có thể sử dụng để đo R như thế nào?

(c) Giả sử gần đúng Born áp dụng tốt, nếu hạt là một proton và $R = 5\times 10^{-13}$ cm, hãy đánh giá một cách gần đúng năng lượng của hạt để tán xạ đủ nhạy cảm đối với độ lớn của R.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Sử dụng gần đúng Born ta có (**Bài tập 6013**)

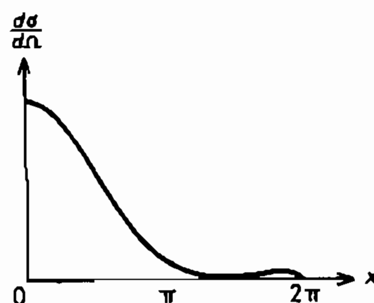
$$f(\theta) \propto \frac{-1}{q} \int_0^\infty rV(r) \sin(qr)\, dr$$
$$= \frac{V_0}{q} \int_0^R r \sin(qr)\, dr = \frac{V_0}{q^3} (\sin qR - qR \cos qR) .$$

Vì vậy

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \left(\frac{\sin x - x \cos x}{x^3} \right)^2 ,$$

trong đó $x = qR = 2kR \sin \frac{\theta}{2}$.

Phân bố góc được biểu diễn trong Hình 6.4.



Hình 6.4

(b) $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ đạt giá trị bằng không đầu tiên khi x thỏa mãn phương trình $x = \tan x$, ứng với $x \approx 1,43\pi$. Từ đó, ta có

$$R = \frac{1,43\pi}{2k \sin \dfrac{\theta_1}{2}} .$$

Bằng cách đo góc nhỏ nhất θ_1 khi $\frac{d\sigma}{d\Omega} = 0$, ta có thể xác định được R

(c) Để R có thể xác định được từ các điểm mà $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ bằng không, ta cần có giá trị lớn nhất của x là $2kR$ phải lớn hơn $1,43\pi$, hay

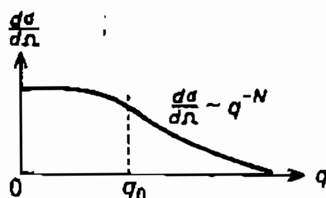
$$E \geq \frac{\hbar^2}{2m_p}\left(\frac{1,43\pi}{2R}\right)^2 = \frac{(1,43\pi)^2}{8}\frac{\hbar^2}{m_p c^2}\left(\frac{c}{R}\right)^2$$

$$= \frac{(1,43\pi)^2}{8} \times \frac{(6,58 \times 10^{-22})^2}{938} \times \left(\frac{3 \times 10^{10}}{5 \times 10^{-13}}\right)^2$$

$$= 4,2\,\text{MeV}\,.$$

6023

Quá trình tán xạ đàn tính với một thế xuyên tâm V có thể được tính một cách thích hợp bằng cách sử dụng gần đúng Born bậc một. Các kết quả thực nghiệm cho thấy tiết diện tán xạ vi phân như một hàm của độ lớn của xung lượng truyền $q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$ có dạng tổng quát sau



Hình 6.5

Hãy biểu diễn theo các tham số được thể hiện trên Hình 6.6:

(a) Kích thước xấp xỉ của thế V (kích thước trong không gian) (Gợi ý: Mở rộng gần đúng Born cho biên độ tán xạ với q nhỏ).

(b) Dạng của thế V ở những khoảng cách rất nhỏ.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Gần đúng Born cho ta (**Bài tập 6013**)

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int rV(r)\,\sin(qr)\,dr\,,$$

trong đó $q\hbar$ là độ lớn của xung lượng truyền và $q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$. Khi $q \to 0$,

$$f(0) \approx -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^R r^2 V(r)\,dr \approx -\frac{2m}{3\hbar^2}R^3\bar{V}\,,$$

ta thay V bằng $\bar{V}$, là một giá trị trung bình nào đó của thế trong khoảng tác dụng hiệu dụng R của thế. Với giá trị nhỏ của xung lượng truyền q_0, ta có

$$f(q_0) \approx -\frac{2m}{\hbar^2 q_0} \int rV(r) \left(q_0 r - \frac{1}{6} q_0^3 r^3\right) dr$$
$$\approx f(0) + \frac{mq_0^2}{15\hbar^2} R^5 \bar{V} = f(0) - \frac{q_0^2}{10} R^2 f(0) .$$

Do vậy, giá trị gần đúng của R được cho bởi công thức

$$R = \sqrt{\frac{10}{q_0^2 |f(0)|} \left(|f(0)| - |f(q_0)| \right)} .$$

Chú ý rằng $|f(q_0)|^2$ là giá trị đo được của $\frac{d\sigma}{d\Omega}|_{q_0}$ với một giá trị nhỏ q_0 nào đó, $|f(0)|^2$ là giá trị của $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ cho một tập hợp q_0 nhỏ ngoại suy tới $q = 0$. Từ các giá trị trên ta có thể ước tính được bán kính tác dụng hiệu dụng của thế.

(b) Quan sát dạng của tiết diện tán xạ vi phân với q lớn, ta có thể thấy rằng đóng góp vào tích phân Born chủ yếu là trong khoảng $qr \leq \pi$, ngoài khoảng này, do sự dao động của hàm sin giữa các giới hạn ± 1, tích phân xấp xỉ bằng 0. Vì vậy, ta chỉ cần xét tích phân từ $qr = 0$ tới π. Giả sử rằng $V(r) \sim r^n$ với r nhỏ, trong đó n sẽ được xác định sau, ta có

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int r^2 V(r) \frac{\sin(qr)}{qr} dr$$
$$\simeq -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\pi} (qr)^2 V(qr) \frac{\sin(qr)}{qr} q^{-(3+n)} d(qr)$$
$$= \frac{1}{q^{3+n}} \left(-\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\pi} x^2 V(\mathrm{x}) \frac{\sin x}{x} dx\right) .$$

So sánh với các số liệu đã cho (trên hình) ta thu được $\frac{N}{2} = 3 + n$. Vậy $\bar{V}$ tỉ lệ với $r^{(\frac{N}{2}-3)}$.

6024

Một mô hình thuận tiện cho thế năng V của một điện tích q tán xạ trên một nguyên tử có điện tích hạt nhân Q là $V = \frac{qQ}{r} e^{-\alpha r}$, trong đó α^{-1} là độ dài đặc trưng cho hiệu ứng chắn của các electron trong nguyên tử.

(a) Dùng gần đúng Born

$$f = -\frac{1}{4\pi}\int e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{r})\,d^3\mathbf{r}$$

tính tiết diện tán xạ σ.

(b) α phụ thuộc như thế nào vào nguyên tử số Z?

(Columbia)

Lời giải:

Với tán xạ đàn tính, $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0| = k$, và $|\Delta\mathbf{k}| = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| = 2k\sin\frac{\theta}{2}$, trong đó θ là góc tán xạ. Vì vậy,

$$\begin{aligned} f &= -\frac{1}{4\pi}\int e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\frac{2m}{\hbar^2}V(r)\,d^3\mathbf{r} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty r^2 dr\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^\pi e^{-i\Delta kr\cos\theta'}V(r)\sin\theta'\,d\theta' \\ &= -\frac{2mqQ}{\Delta k\hbar^2}\int_0^\infty e^{-\alpha r}\sin(\Delta kr)\,dr \\ &= -\frac{2mqQ}{\hbar^2}\frac{1}{(\alpha^2 + \Delta k^2)}. \end{aligned}$$

Do đó

$$\sigma = |f(\theta)|^2 = \frac{4m^2q^2Q^2}{\hbar^4\left[\alpha^2 + 4k^2\sin^2(\theta/2)\right]^2}.$$

(b) Trong gần đúng Thomas - Fermi, khi Z lớn, các electron trong nguyên tử có thể được xem như một chất khí Fermi. Một electron như vậy nằm trong trạng thái liên kết của nguyên tử, năng lượng của nó thấp hơn $E(\infty) = 0$. Vì vậy, giá trị xung lượng khả dĩ lớn nhất của nó $p_{\max}$ tại r phải thoả mãn

$$\frac{1}{2m}p_{\max}^2(r) - e\phi(r) = 0, \tag{1}$$

trong đó $\phi(r)$ là thế tại khoảng cách r tính từ hạt nhân, vì năng lượng lớn nhất của electron có giá trị âm. Vì vậy, xung lượng Fermi tại r là

$$p_f(r) = p_{\max}(r) = [2me\phi(r)]^{1/2}.$$

Với một chất khí Fermi,

$$p_f = \hbar(3\pi^2 n)^{1/3},$$

trong đó n là mật độ hạt. So sánh với các biểu thức ở trên

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\left[2me\phi(r)\right]^{3/2}$$
$$= \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\left(2me\,\frac{Ze}{r}\,e^{-\alpha r}\right)^{\frac{3}{2}},$$

trong đó Ze là điện tích hạt nhân. Vì nguyên tử trung hoà về điện, nên

$$Z = \int n d^3\mathbf{r} = 4\pi\int_0^\infty n(r)\,r^2\,dr$$
$$= \frac{4}{3\pi\hbar^3}(2mZe^2)^{3/2}\int_0^\infty e^{-\frac{3}{2}\alpha r}\,r^{1/2}\,dr$$
$$= \frac{2}{3\sqrt{\pi}\hbar^3}\left(\frac{4mZe^2}{3\alpha}\right)^{3/2}.$$

Do đó

$$\alpha = \frac{4me^2}{3\hbar^2}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3} Z^{1/3} = \frac{4}{3}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3}\frac{1}{a_0}Z^{1/3},$$

trong đó $a_0 = \hbar^2/me^2$ là bán kính Bohr.

6025

Một hạt khối lượng m tán xạ trên thế $V(\mathbf{r}) = V_0\exp(-r/a)$.

(a) Tìm tiết diện tán xạ vi phân trong gần đúng Born bậc một. Vẽ sự phụ thuộc vào góc trong hai trường hợp khi số sóng k của hạt bị tán xạ nhỏ và lớn. Với giá trị nào của k thì quá trình tán xạ trở nên bất đẳng hướng một cách rõ rệt? So sánh giá trị này với giá trị thu được từ các lập luận cơ bản dựa vào mômen xung lượng.

(b) Tiêu chuẩn để gần đúng Born áp dụng được là

$$|\Delta\psi^{(1)}(0)/\psi^{(0)}(0)| \ll 1,$$

trong đó $\Delta\psi^{(1)}$ là bổ chính bậc nhất với sóng tới $\psi^{(0)}$. Hãy tìm tiêu chuẩn này một cách tường minh cho thế đang xét. Kết quả thu được trong giới hạn k nhỏ là như thế nào? Liên hệ điều đó với thế hút cần thiết để có trạng thái kiên kết

(xem xét cách đặt của bài toán). Giới hạn k lớn của tiêu chuẩn này hạn chế ít hơn hay nhiều hơn đối với cường độ của thế.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Gần đúng Born bậc một cho ta

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r'V(r')\sin(qr')\,dr' \\ &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r'\sin(qr')\exp(-r'/a)\,dr' \\ &= -\frac{4mV_0a^3}{\hbar^2(1+q^2a^2)^2}, \end{aligned}$$

trong đó $q = 2k\sin(\theta/2)$, $q\hbar$ là độ lớn của xung lượng truyền trong quá trình tán xạ. Do vậy

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{16m^2V_0^2a^6}{\hbar^4\left(1+4k^2a^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}\right)^4}.$$

Phân bố góc $\sigma(\theta)/\sigma(0)$ được vẽ trên Hình 6.5 khi $ka = 0$ và $ka = 1$.

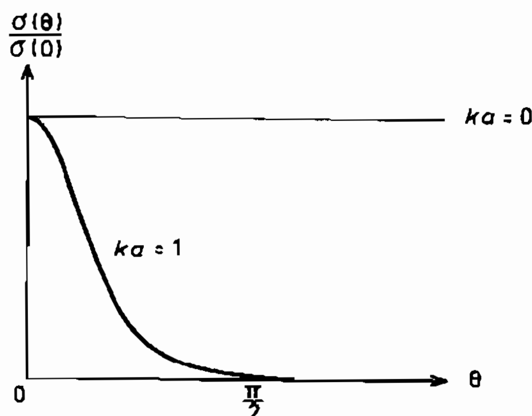
Có thể thấy rằng với $ka \gtrsim 1$, quá trình tán xạ trở nên bất đẳng hướng một cách rõ rệt. Mômen xung lượng trong trường hợp chỉ có sóng s tán xạ khi quá trình tán xạ là đẳng hướng phải thoả mãn điều kiện

$$a\cdot k\hbar \le \hbar, \quad \text{nghĩa là}, \quad ka \le 1\,.$$

Khi $ka \sim 1$, quá trình tán xạ bắt đầu trở nên bất đẳng hướng một cách rõ rệt. Điều này phù hợp với kết quả thu được từ gần đúng Born bậc một.

(b) Hàm sóng tính tới bổ chính bậc một là

$$\psi(r) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{r}')\,e^{ikz'}\,dV'\,.$$



Hình 6.6

Vì thế

$$\left|\frac{\Delta\psi^{(1)}(0)}{\psi^{(0)}(0)}\right| = \left|\frac{V_0}{4\pi}\int\frac{e^{ikr'}}{r'}\frac{2m}{\hbar^2}e^{-r'/a+ikz'}dV'\right|$$
$$= \left|\frac{mV_0}{\hbar^2}\int r'\,e^{ikr'-r'/a+ikr'\cos\theta'}\sin\theta'\,d\theta' dr'\right|$$
$$= \frac{2m|V_0|a^2\sqrt{1+4k^2a^2}}{\hbar^2(4k^2a^2+1)} = \frac{2m|V_0|a^2}{\hbar^2\sqrt{1+4k^2a^2}}\,.$$

Vậy, tiêu chuẩn để áp dụng được gần đúng Born là

$$\frac{2m|V_0|\,a^2}{\hbar^2\sqrt{1+4k^2a^2}} \ll 1\,.$$

Trong giới hạn k nhỏ, $ka \ll 1$, tiêu chuẩn trên trở thành

$$\frac{2m|V_0|\,a^2}{\hbar^2} \ll 1, \qquad \text{hay} \qquad |V_0| \ll \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,.$$

Trong giới hạn k lớn, $ka \gg 1$, tiêu chuẩn đó trở thành

$$\frac{m|V_0|a}{\hbar^2 k} \ll 1, \qquad \text{hay} \qquad |V_0| \ll \frac{\hbar^2 k}{ma}\,.$$

Bởi vì, trong trường hợp này $k \gg \frac{1}{a}$ nên sự hạn chế đối với $|V_0|$ là nhỏ hơn

so với giới hạn k nhỏ.

6026

Với thế tương tác $V(r) = \beta r^{-1}\exp(-\alpha r)$ hãy tìm tiết diện tán xạ vi phân trong gần đúng Born. Điều kiện để gần đúng Born cho kết quả tốt là gì? Hãy đề xuất một hay một số áp dụng vật lý của mô hình này.

(Berkeley)

Lời giải:

Trong gần đúng Born, trước hết ta tính **(Bài tập 6013)**

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r' V(r')\sin qr'\,dr'$$
$$= -\frac{2m\beta}{\hbar^2 q}\int_0^\infty e^{-\alpha r}\sin qr\,dr = \frac{-2m\beta}{\hbar^2(q^2+\alpha^2)},$$

trong đó $q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$ và m là khối lượng hạt, sau đó ta có ngay tiết diện tán xạ vi phân

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{4m^2\beta^2}{\hbar^4(q^2+\alpha^2)^2}.$$

Ta dẫn ra kết quả này dựa trên giả thiết thế tương tác có thể xem như một nhiễu loạn, từ đó có thể viết hàm sóng của hạt bị tán xạ dưới dạng

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \psi_1(\mathbf{r}), \qquad \text{trong đó} \quad |\psi_1| \ll |\psi_0|,$$
$$\psi_0(\mathbf{r}) = e^{ikz},$$
$$\psi_1(\mathbf{r}) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}V(\mathbf{r}')\,\psi_0(\mathbf{r}')\,d^3r'.$$

Đặc biệt, ta sẽ xét 2 trường hợp, khi lấy a là kích thước của vùng không gian trong đó thế có giá trị đáng kể.

(i) Độ lớn của thế đủ nhỏ hoặc trường thế đủ định xứ. Vì

$$|\psi_1| \le \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{|V(\mathbf{r}')|}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}|\psi_0(\mathbf{r}')|d^3r'$$
$$\approx \frac{m}{2\pi\hbar^2}|V|\,|\psi_0|\int_0^a \frac{4\pi\bar{r}^2 d\bar{r}}{\bar{r}}$$
$$\approx m|V|a^2|\psi_0|/\hbar^2,$$

nên để thỏa mãn điều kiện $|\psi_1| \ll |\psi_0|$ ta cần có

$$\frac{m|V|a^2}{\hbar^2} \ll 1,$$

tức là,

$$|V| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \qquad \text{hay} \qquad a \ll \frac{\hbar}{\sqrt{m|V|}}.$$

Điều này nghĩa là khi độ lớn của thế đủ nhỏ hoặc trường thế đủ định xứ, gần đúng Born có thể áp dụng tốt. Chú ý rằng điều kiện trên không liên quan gì tới vận tốc của hạt tới, vì thế chỉ cần thế thoả mãn điều kiện này thì gần đúng Born áp dụng tốt với hạt tới có năng lượng bất kì

(ii) Tán xạ ở năng lượng cao với $ka \gg 1$. Gần đúng Born giả thiết rằng $\psi_0 = e^{ikz}$ và hàm ψ_1 thoả mãn phương trình

$$\nabla^2\psi_1 + k^2\psi_1 = \frac{2m}{\hbar^2} V e^{ikz}.$$

Đặt $\psi_1 = e^{ikz} f(\theta, \varphi)$. Phương trình trên trở thành

$$\frac{\partial f}{\partial z} = -\frac{im}{\hbar^2 k} V,$$

và vì thế

$$\psi_1 = e^{ikz} f = -\frac{im}{\hbar^2 k} e^{ikz} \int V\, dz.$$

Từ đó, do

$$|\psi_1| \sim \frac{m}{\hbar^2 k} |V| a |\psi_0|,$$

nên để thỏa mãn điều kiện $|\psi_1| \ll |\psi_0| = 1$ ta phải có

$$|V| \ll \frac{\hbar^2 k}{ma} = \frac{\hbar v}{a},$$

trong đó v là tốc độ của hạt tới, $v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$. Như vậy, chỉ cần năng lượng của hạt tới đủ lớn, gần đúng Born sẽ áp dụng tốt.

Từ những kết quả trên ta thấy nếu trường thế có thể xem như một nhiễu loạn nhỏ đối với hạt tới có năng lượng thấp, thì cũng có thể coi là nhiễu loạn nhỏ với hạt tới có năng lượng cao. Tuy nhiên, điều ngược lại thì không đúng. Trong bài toán đang xét, khoảng tác dụng của thế có thể lấy bằng $a \approx \frac{1}{\alpha}$, tức là $V(a) \sim \frac{\beta}{a}$. Cho nên các điều kiện trên trở thành

(i) $|\beta| \ll \frac{\alpha\hbar^2}{m}$,

(ii) $|\beta| \ll \hbar v = \frac{\hbar^2 k}{m}$, trong đó $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

Thế được cho ở trên đã được Yukawa sử dụng để biểu diễn tương tác giữa hai hạt nhân và giải thích tầm tác dụng ngắn của lực tương tác mạnh của hạt nhân.

6027

Xét quá trình tán xạ của một proton có năng lượng 1 keV với một nguyên tử hydro.

(a) Phân bố góc sẽ có dạng như thế nào (vẽ đồ thị và giải thích kết quả thu được).

(b) Đánh giá tiết diện tán xạ toàn phần. Tính số với đơn vị cm^2, m^2 hoặc barns $= 10^{-24}$ cm^2, và giải thích tại sao.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Bài toán này tương đương với quá trình tán xạ của hạt có khối lượng rút gọn $\mu \approx \frac{1}{2}m_p = 470$ MeV, năng lượng $E_r = 0,5$ keV lên một thế có dạng $\frac{e^2}{r} e^{-r/a}$ nếu tính đến hiệu ứng chắn của lớp vỏ electron, trong đó a là tầm tác dụng được lấy bằng bán kính Bohr 0,53 Å. Vì

$$\begin{aligned} ka &= \frac{a}{\hbar c}\sqrt{2\mu c^2 E_r} \\ &= \frac{0,53 \times 10^{-8} \times \sqrt{2 \times 470 \times 10^6 \times 0,5 \times 10^3}}{6,58 \times 10^{-16} \times 3 \times 10^{10}} = 1,84 \times 10^2 \gg 1\,, \end{aligned}$$

cho nên để áp dụng được gần đúng Born ta cần có điều kiện sau (**Bài tập 6026**)

$$|V| \sim \frac{e^2}{a} \ll \frac{\hbar v}{a}\,,\ \text{nghĩa là,}\ \frac{e^2}{\hbar c} \ll \frac{v}{c}\,.$$

Do

$$\text{LHS} = \frac{1}{137} = 7,3 \times 10^{-3}\,,$$

$$\text{RHS} = \sqrt{\frac{2E_r}{\mu c^2}} = \sqrt{\frac{2 \times 0,5 \times 10^3}{470 \times 10^6}} = 1,5 \times 10^{-3},$$

điều kiện trên không hẳn được thoả mãn một cách thỏa đáng. Nhưng để đánh giá một cách đại thể, ta vẫn có thể áp dụng gần đúng Born.

(a) Khi proton va chạm với nguyên tử hydro, nó chịu cả tác dụng của tương tác đẩy Coulomb với hạt nhân, lẫn tương tác hút của electron quỹ đạo được coi như một đám mây điện tích có mật độ $e\rho(r)$. Do vậy, thế năng tương tác của proton bằng

$$V(r) = \frac{e^2}{r} - e^2 \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'.$$

Dùng gần đúng Born và công thức

$$\int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{r} d\mathbf{r} = \frac{4\pi}{q^2},$$

ta thu được

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{\mu e^2}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left[\frac{1}{r} - \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'\right] d\mathbf{r} \\ &= -\frac{2\mu e^2}{\hbar^2 q^2} [1 - F(\theta)], \end{aligned}$$

trong đó

$$\mu = \frac{m_p}{2}, \qquad q = 2k \sin\frac{\theta}{2},$$

$$\begin{aligned} F(\theta) &= \frac{q^2}{4\pi} \int\int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \rho(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' d\mathbf{r} \\ &= \frac{q^2}{4\pi} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \rho(r') d\mathbf{r}' \int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\bar{\mathbf{r}}}}{\bar{r}} d\bar{\mathbf{r}} \\ &= \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \rho(r) d\mathbf{r}. \end{aligned}$$

Với trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro, ta có

$$\rho(r) = |\psi_{100}|^2 = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a},$$

cho nên

$$F(\theta) = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \frac{2r}{a}} d\mathbf{r}$$

$$= \left(1 + \frac{a^2q^2}{4}\right)^{-2}.$$

Vậy

$$f(\theta) = -\frac{\mu e^2}{2\hbar^2 k^2} \cdot \frac{1}{\sin^2(\theta/2)} \left[1 - \frac{1}{(1 + a^2k^2 \sin^2 \theta/2)^2}\right].$$

Chú ý tới tính đồng nhất của hai hạt tán xạ (hai proton), ta có đối với trạng thái đơn tuyến: $\sigma_s = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2$, còn đối với trạng thái tam tuyến: $\sigma_A = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2$.

Vậy tiết diện tán xạ (không xét đến sự phân cực) là

$$\sigma = \frac{1}{4}\sigma_s + \frac{3}{4}\sigma_A.$$

Dưới đây, ta xét một vài trường hợp đặc biệt.

(i) $\theta \approx 0$:

$$\sigma_s = \frac{\mu^2 e^4}{4\hbar^4 k^4}\left[\frac{1 - F(\theta)}{\sin^2 \theta/2} + \frac{1 - F(\pi - \theta)}{\cos^2 \theta/2}\right]^2$$

$$\approx \frac{\mu^2 e^4}{4\hbar^4 k^4}\left(2a^2k^2 + \frac{1}{\cos^2 \theta/2}\right)^2$$

$$\approx \frac{\mu^2 e^4}{\hbar^4} a^4 = \left(\frac{m_p}{2m_e}\right)^2 a^2,$$

Để thu được công thức trên ta đã sử dụng gần đúng khi $x \approx 0$

$$1/(1 + x)^2 \approx 1 - 2x,$$

và biểu thức

$$a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}\left(\frac{m_p}{2me}\right).$$

Hoàn toàn tương tự ta thu được

$$\sigma_A = \left(\frac{m_p}{2m_e}\right)^2 a^2.$$

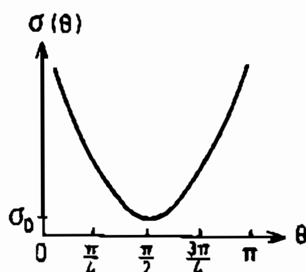
(ii) $\theta \approx \pi$: Bằng những tính toán tương tự ta có

$$\sigma_s = \sigma_A = \left(\frac{m_p}{2m_e}\right)^2 a^2 .$$

(iii) $a^2k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} = 10$ hay $\theta \approx 0,07\pi$: Với $0,07\pi \leq \theta \leq 0,93\pi$, ta có

$$\begin{aligned}\sigma(\theta) &= \frac{1}{4} \frac{\mu^2 e^4}{4\hbar^4 k^4} \left(\frac{1}{\sin^2 \theta/2} + \frac{1}{\cos^2 \theta/2}\right)^2 \\ &\quad + \frac{3}{4} \frac{\mu^2 e^4}{4\hbar^4 k^4} \left(\frac{1}{\sin^2 \theta/2} - \frac{1}{\cos^2 \theta/2}\right)^2 \\ &= \frac{\mu^2 e^4}{\hbar^4 k^4} \left(\frac{3 \cos^2 \theta + 1}{\sin^4 \theta}\right) \\ &= \sigma_0 \left(\frac{3 \cos^2 \theta + 1}{\sin^4 \theta}\right) ,\end{aligned}$$

trong đó $\sigma_0 = \frac{\mu^2 e^4}{\hbar^4 k^4}$. Phân bố góc được biểu diễn trong Hình 6.7.



Hình 6.7

(b) Bởi vì $f(\theta) \to \infty$ khi $\theta \to 0$, $\theta \to \pi$, nên khi đánh giá tiết diện tán xạ toàn phần, hãy xét các trường hợp với các góc tán xạ lớn ($0,07\pi \leq \theta \leq 0,93\pi$) và các góc tán xạ nhỏ

$$\begin{aligned}\sigma_{t\,\text{lớn}} &= 2\pi\sigma_0 \int_{0,07\pi}^{0,93\pi} \left(\frac{3 \cos^2 \theta + 1}{\sin^4 \theta}\right) \sin \theta \, d\theta \\ &= 2\pi\sigma_0 \int_{0,07\pi}^{0,93\pi} \frac{4 - 3\sin^2 \theta}{\sin^3 \theta} d\theta \\ &= 2\pi\sigma_0 \left[-\ln \left(\tan \frac{\theta}{2}\right) - 2\frac{\cot \theta}{\sin \theta}\right] \Bigg|_{0,07\pi}^{0,93\pi} = 155\pi\sigma_0 ,\end{aligned}$$

$$\sigma_{t\,\text{nhỏ}} > 2\pi \int_0^{0,07\pi} \sigma(0,07\pi)\sin\theta\, d\theta \times 2$$
$$= 2\pi \times 1703\sigma_0 [1 - \cos(0,07\pi)] \times 2$$
$$= 164\pi\sigma_0 .$$

6028

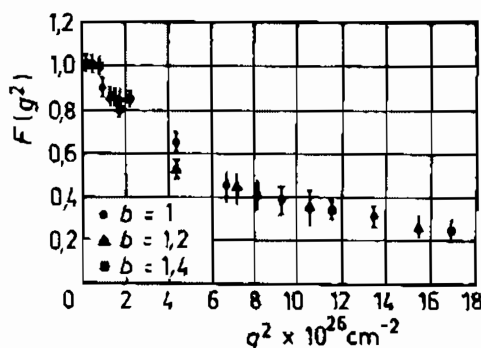
Việc nghiên cứu quá trình tán xạ của các electron năng lượng cao với hạt nhân đã dẫn đến nhiều thông tin đáng quan tâm về sự phân bố điện tích trong hạt nhân và các nucleon. Ở đây, ta sẽ xét một mô hình đơn giản, trong đó các electron giả thiết không có spin. Ta cũng giả thiết là hạt nhân, với điện tích Ze, không thay đổi vị trí trong không gian (nghĩa là giả thiết nó có khối lượng vô cùng lớn). Gọi $\rho(\mathbf{x})$ là mật độ điện tích trong hạt nhân. Giả thiết phân bố điện tích có đối xứng cầu. Gọi $f_e(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f)$ là biên độ tán xạ trong gần đúng Born bậc một của quá trình tán xạ giữa một electron với một hạt nhân được xét gần đúng như một điện tích điểm Ze, trong đó $\mathbf{p}_i$ là xung lượng trước tán xạ và $\mathbf{p}_f$ là xung lượng sau tán xạ. Gọi $f(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f)$ là biên độ tán xạ, cũng trong gần đúng Born bậc một, của quá trình tán xạ giữa một electron và một hạt nhân thực có cùng điện tích Ze. Kí hiệu $\mathbf{q} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f$ là xung lượng truyền. Đại lượng F được xác định bởi $f(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f) = F(\mathbf{q}^2)\, f_e(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f)$ được gọi là thừa số dạng: dễ dàng thấy rằng F thực ra phụ thuộc vào $\mathbf{p}_i$ và $\mathbf{p}_f$ chỉ thông qua đại lượng $\mathbf{q}^2$.

(a) Thừa số dạng $F(\mathbf{q}^2)$ và ảnh Fourier của mật độ điện tích $\rho(\mathbf{x})$ liên hệ với nhau qua một hệ thức rất đơn giản. Hãy dẫn ra hệ thức này trong khuôn khổ lý thuyết Schrödinger phi tương đối tính. Giả thiết các electron là phi tương đối tính được đưa ra để làm cho bài toán trở nên đơn giản nhất có thể, nhưng nếu xem xét kĩ hơn thì có thể thấy rõ ràng là giả thiết này không cần thiết: kết quả đó vẫn áp dụng được cả trong trường hợp tương đối tính trong các thí nghiệm thực tế. Ngay cả việc không xét đến spin của electron cũng không ảnh hưởng đến thực chất vấn đề mà ta đang quan tâm.

(b) Đồ thị trong Hình 6.8 thể hiện một số kết quả thực nghiệm liên quan đến thừa số dạng đối với proton. Giả sử là lý thuyết mà ta đang xét áp dụng được với các số liệu đó. Dựa vào các số liệu được đưa ra, hãy tính trung bình bình phương của bán kính (điện tích) của hạt nhân. *Gợi ý*: Chú ý rằng có một mối liên hệ đơn giản giữa trung bình bình phương bán kính và đạo hàm của

thừa số dạng $F(\mathbf{q}^2)$ theo $\mathbf{q}^2$ tại $\mathbf{q}^2 = 0$. Đầu tiên hãy tìm mối liên hệ này để từ đó tìm ra kết quả.

(*Berkeley*)



Hình 6.8

Lời giải:

(a) Trong lý thuyết Schrödinger phi tương đối tính, gần đúng Born bậc một cho ta biên độ tán xạ của một electron (có điện tích $-e$) do một trường lực xuyên tâm như sau

$$f(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r' V(r') \sin(qr')\, dr' \,,$$

trong đó q là độ lớn của xung lượng truyền trong quá trình tán xạ.

Khi coi hạt nhân là một điểm, thế năng tán xạ là

$$V_e(r) = -\frac{Ze^2}{r} \,.$$

Với hạt nhân thực với mật độ điện tích $\rho(\mathbf{r})$, thế năng tán xạ là

$$V(r) = -e \int \frac{\rho(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = -4\pi e \int_0^\infty \frac{\rho(r')\, r'^2\, dr'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \,,$$

thế năng này thoả mãn phương trình Poisson

$$\nabla^2 V(r) = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rV) = +4\pi e \rho(r) \,. \tag{1}$$

Xét tích phân trong biểu thức của f

$$\int_0^\infty rV\, e^{iqr}\, dr = \frac{1}{iq}\left[e^{iqr}\left(rV - \frac{1}{iq}(rV)'\right)\right]\Bigg|_0^\infty - \frac{1}{q^2}\int_0^\infty (rV)'' e^{iqr}\, dr\,.$$

Bằng phương pháp của Wentzel, số hạng đầu tiên có thể cho bằng 0 và vì vậy

$$\begin{aligned} f(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f) &= -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty rV(r)\sin(qr)\, dr \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2 q}\left(-\frac{1}{q^2}\right)\int_0^\infty (rV)''\sin qr\, dr \\ &= \frac{2m}{\hbar^2 q}\frac{4\pi e}{q^2}\int_0^\infty r\rho(r)\sin(qr)\, dr\,, \end{aligned} \tag{2}$$

nếu dựa vào phương trình (1).

Trong trường hợp hạt nhân là điện tích điểm, chỉ có miền gần $r = 0$ mới đóng góp đáng kể vào tích phân, vì vậy

$$4\pi\int_0^\infty r\rho(r)\sin(qr)\, dr \approx 4\pi q\int_0^\infty r^2\rho(r)\, dr = qZe\,.$$

Do đó nếu coi hạt nhân là một điểm, thì

$$f_e(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f) = \frac{2mZe^2}{\hbar^2 q^2}\,.$$

Khi chú ý tới kích thước hạt nhân, ta có thể viết

$$f(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f) = f_e(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f)\cdot\frac{4\pi}{Ze}\int_0^\infty r^2\rho(r)\frac{\sin(qr)}{qr}\, dr\,.$$

Theo định nghĩa thừa số dạng là

$$F(\mathbf{q}^2) = \frac{4\pi}{Ze}\int_0^\infty r^2\rho(r)\frac{\sin(qr)}{qr}\, dr\,, \tag{3}$$

hay

$$F(\mathbf{q}^2) = \frac{1}{Ze}\int \rho(\mathbf{r})\, e^{-\mathbf{q}\,\mathbf{r}}\, d\mathbf{r}\,.$$

Đây chính là mối liên hệ cần tìm giữa thừa số dạng và ảnh Fourier của mật độ điện tích.

(b) Lấy đạo hàm phương trình (3) theo q, ta có

$$\frac{dF}{dq} = \frac{4\pi}{Ze}\int_0^\infty r^2\rho(r)\left[\frac{r\cos(qr)}{qr} - \frac{\sin(qr)}{q^2 r}\right]dr\,,$$

và từ đó

$$\frac{dF}{d(q^2)} = \frac{dF}{dq}\frac{dq}{d(q^2)} = \frac{1}{2q}\cdot\frac{4\pi}{Ze}\int_0^\infty r^2\rho(r)\left[\frac{r\cos(qr)}{qr} - \frac{\sin(qr)}{q^2 r}\right]dr\,.$$

Để tìm $\frac{dF}{d(q^2)}\big|_{q^2-0}$ trước hết ta tính

$$\begin{aligned}
&\lim_{q\to 0}\left[\frac{r\cos(qr)}{q^2 r} - \frac{\sin(qr)}{q^3 r}\right]\\
&= \lim_{q\to 0}\left[\frac{r\cdot\left[1-\frac{1}{2}(qr)^2\right]}{q^2 r} - \frac{qr - \frac{1}{6}(qr)^3}{q^3 r}\right]\\
&= \lim_{q\to 0}\left(-\frac{1}{3}r^2\right) = -\frac{r^2}{3}\,.
\end{aligned}$$

Vậy

$$\left.\frac{dF}{d(q^2)}\right|_{q^2-0} = -\frac{1}{6}\cdot\frac{1}{Ze}\int_0^\infty r^2\rho(r)\cdot 4\pi r^2\,dr = -\frac{1}{6}\langle r^2\rangle\,.$$

Từ Hình 6.8 ta có thể tính được hệ số góc của đường cong $F(q^2)$ tại $q^2 = 0$, từ đó tìm được căn quân phương của điện tích bán kính hạt nhân

$$\sqrt{\langle r^2\rangle} = \left(-6\left.\frac{dF}{d(q^2)}\right|_{q^2-0}\right)^{1/2}.$$

6029

Trong thời kì đầu những năm 1920, Ramsauer và Townsend (độc lập với nhau) đã phát hiện ra rằng tiết diện tán xạ của các electron với năng lượng

vào cỡ $\sim 0,4$ eV nhỏ hơn rất nhiều so với tiết diện hình học (πa^2, với a là bán kính nguyên tử) trong khi xét tán xạ trên các nguyên tử argon ở thể khí. Người ta cũng thấy rằng tiết diện tán xạ với năng lượng 6 eV lớn gấp 3,5 lần tiết diện hình học và quá trình tán xạ gần như là đẳng hướng. Bản chất của những tiết diện "dị thường" này là gì? Tiết diện lớn nhất có thể trong quá trình tán xạ của electron có năng lượng thấp (với bước sóng $\lambda \gg a$) là bao nhiêu?

(Princeton)

Lời giải:

Nếu thế hút đủ mạnh, tại một năng lượng nào đó sóng riêng phần với $\ell = 0$ sẽ có thêm đúng một nửa chu kì dao động trong thế của nguyên tử. Khi đó, nó sẽ có độ dịch pha của sóng là $\delta = \pi$ và vì vậy không đóng góp gì vào $f(\theta)$ cũng như vào tiết diện tán xạ. Ở năng lượng thấp, bước sóng của electron lớn so với a vì thế đóng góp của các sóng riêng phần có ℓ lớn hơn cũng không đáng kể. Đây là nguyên nhân dẫn đến hiệu ứng Ramsauer – Townsend trong đó tiết diện tán xạ rất nhỏ ở một năng lượng nhất định. Với các electron có năng lượng thấp, tiết diện tán xạ lớn nhất khả dĩ lớn gấp 4 lần tiết diện hình học. Cần chú ý rằng một nguyên tử khí hiếm có các lớp vỏ lấp đầy hoàn toàn, thì kích thước khá nhỏ và lực tổng hợp do hạt nhân và các electron quỹ đạo tác dụng lên electron tới là lớn và xác định tầm tác dụng một cách rõ nét.

6030

Gọi $f(\omega)$ là biên độ tán xạ về phía trước của ánh sáng lên một tâm tán xạ riêng lẻ trong môi trường quang học. Nếu kí hiệu biên độ sóng ánh sáng tới và sóng ánh sáng ra lần lượt là $A_{\text{in}}(\omega)$ và $A_{\text{out}}(\omega)$, ta có $A_{\text{out}}(\omega) = f(\omega)\, A_{\text{in}}(\omega)$. Giả thiết rằng biến đổi Fourier

$$\bar{A}_{\text{in}}(x-t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega(x-t)}\, A_{\text{in}}(\omega)\, d\omega$$

bằng 0 khi $x - t > 0$.

(a) Sử dụng điều kiện nhân quả (không có sự lan truyền nào nhanh hơn tốc độ ánh sáng $c = 1$) để chứng minh rằng $f(\omega)$ là hàm giải tích trên nửa mặt phẳng $\text{Im}\,\omega > 0$.

(b) Sử dụng tính chất giải tích của $f(\omega)$ và tính thực của $\bar{A}_{\text{in}}(\omega)$ và $\bar{A}_{\text{out}}(\omega)$,

đồng thời giả sử rằng $f(\omega)$ là hữu hạn ở vô cực để dẫn ra hệ thức tán sắc

$$Re[f(\omega + i\varepsilon) - f(0)] = \frac{2\omega^2}{\pi} P \int_0^\infty d\omega' \frac{\text{Im}\, f(\omega' + i\varepsilon)}{\omega'(\omega'^2 - \omega^2)},$$

với ε là đại lượng dương nhỏ tuỳ ý.

(*Chicago*)

Lời giải:

(a) $\tilde{A}_{\text{in}}(x - t) = 0$ với $t < x$ nghĩa là $\tilde{A}_{\text{out}}(x - t) = 0$ với $t < x$. Từ đó

$$A_{\substack{\text{in}\\ \text{out}}}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^0 e^{-i\omega\tau} \tilde{A}_{\substack{\text{in}\\ \text{out}}}(\tau)\, d\tau$$

là một hàm chính quy khi $\text{Im}\,\omega > 0$, bởi vì khi $\tau < 0$ thừa số $\exp(\text{Im}\,\omega\tau)$ của hàm dưới dấu tích phân sẽ hội tụ. Vì $A_{\text{out}}(\omega) = f(\omega)\, A_{\text{in}}(\omega)$, $f(w)$ cũng là một hàm giải tích với $\text{Im}\,\omega > 0$.

(b) Khi $\omega \to \infty$, $0 \leq \arg \omega \leq \pi$, ta có $|f(\omega)| < M$, một số dương nào đó. Giả sử $f(0)$ hữu hạn (nếu không thì ta có thể chọn một điểm khác mà tại đó f hữu hạn). Khi đó, $\chi(\omega) = \frac{f(\omega) - f(0)}{\omega}$ đủ nhỏ ở vô cùng, và do vậy

$$\chi(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi(\omega' + i0)}{\omega' - \omega}\, d\omega', \qquad \text{Im}\,\omega > 0.$$

Với ω là số thực, sử dụng hệ thức

$$\frac{1}{\omega' - \omega - i0} = \frac{P}{\omega' - \omega} + i\pi\delta(\omega' - \omega),$$

ta thu được

$$Re\, \chi(\omega) = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im}\, \chi(\omega' + i0)}{\omega' - \omega}\, d\omega'.$$

$\tilde{A}_{\substack{\text{in}\\ \text{out}}}(\omega)$ là số thực đồng nghĩa với $A^*_{\substack{\text{in}\\ \text{out}}}(-\omega^*) = A_{\substack{\text{in}\\ \text{out}}}(\omega)$. Vì vậy $f^*(\omega^*) = f(-\omega)$, cho nên $\text{Im}\, f(\omega + i0) = -\text{Im}\, f(-\omega + i0)$, và

$$\text{Re}\,[f(\omega + i0) - f(0)] = \frac{2\omega^2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\text{Im}\, f(\omega' + i0)}{\omega'(\omega'^2 - \omega^2)}\, d\omega',$$

trong đó P là kí hiệu giá trị chính của tích phân.

6031

Một hạt với spin 1/2 và khối lượng m, năng lượng $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ tán xạ trên một bia vô cùng nặng với spin 1/2. Hamiltonian tương tác là

$$H_{\text{int}} = A\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \frac{e^{-\mu r}}{r} \qquad (\mu > 0),$$

trong đó $\boldsymbol{\sigma}_1$ và $\boldsymbol{\sigma}_2$ lần lượt là các toán tử spin Pauli của hạt và bia. Tính tiết diện tán xạ vi phân $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ trong gần đúng Born bậc thấp nhất, lấy trung bình theo các trạng thái phân cực spin ban đầu và lấy tổng theo các trạng thái phân cực spin cuối. Biểu diễn $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ như một hàm của k và góc tán xạ θ.

(*Princeton*)

Lời giải:

Giả sử hạt tới bia dọc theo trục z, nghĩa là, $\mathbf{k}_0 = k\mathbf{e}_z$. Trong gần đúng Born bậc thấp nhất, biên độ tán xạ là

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} A\sigma_1 \cdot \sigma_2 \frac{e^{-\mu r'}}{r'} d^3r' \\ &= \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} A\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \frac{e^{-\mu r'}}{r'} d^3r' \\ &= \frac{-m}{\hbar^2} A\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \int_0^\infty e^{-\mu r'} r' dr' \int_0^\pi e^{iqr'\cos\theta} \sin\theta \, d\theta \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} A\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \frac{1}{\mu^2 + q^2}, \end{aligned}$$

trong đó $\mathbf{q} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$, $q = 2k \sin\frac{\theta}{2}$. Kí hiệu spin tổng cộng của hệ là $\mathbf{S}$. Khi đó $\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)$ và

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 &= \frac{1}{2}(\sigma^2 - \sigma_1^2 - \sigma_2^2) = \frac{\hbar^2}{2}[4S(S+1) - 3 - 3] \\ &= \frac{\hbar^2}{2}[4S(S+1) - 6]. \end{aligned}$$

Với $S = 0$ thì $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = -3\hbar^2$ và

$$f_0(\theta) = \frac{6Am}{\mu^2 + q^2}, \quad \frac{d\sigma_0}{d\Omega} = \frac{(6Am)^2}{(\mu^2 + q^2)^2}.$$

Còn với $S = 1$ thì $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = \hbar^2$ và

$$f_1(\theta) = -\frac{2Am}{\mu^2 + q^2}, \quad \frac{d\sigma_1}{d\Omega} = \frac{(2Am)^2}{(\mu^2 + q^2)^2}.$$

Nếu trạng thái spin lúc đầu của đạn và bia lần lượt là $\binom{1}{0}_P = \alpha_P$, $\binom{1}{0}_T = \alpha_T$, thì trạng thái spin ban đầu của hệ là $\Theta_{11} = \alpha_P\alpha_T$, sóng tán xạ là $f_1(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\Theta_{11}$, và tiết diện tán xạ vi phân tương ứng được cho bởi các công thức

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2};\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\right) = |f_1(\theta)|^2,$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2};\,\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2}\right) = \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2};\,-\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\right) = \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2};\,-\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2}\right) = 0.$$

Chú ý rằng các vectơ trạng thái tam tuyến là

$$\Theta_{11} = \alpha_P\alpha_T, \quad \Theta_{1,-1} = \beta_P\beta_T, \qquad \Theta_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_P\beta_T + \beta_P\alpha_T),$$

còn vectơ trạng thái đơn tuyến là

$$\Theta_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_P\beta_T - \beta_P\alpha_T)$$

và

$$\alpha_P\beta_T = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Theta_{10} + \Theta_{00}), \qquad \text{v.v.}$$

ta có thể thu được các tiết diện tán xạ vi phân còn lại như sau

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2};\,\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4}|f_1(\theta) - f_0(\theta)|^2,$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2};\,-\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4}|f_1(\theta) - f_0(\theta)|^2,$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2};\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\right) = \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2};\,-\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2}\right) = 0;$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2}\,\frac{1}{2};\,\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4}|f_1(\theta) - f_0(\theta)|^2,$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2}\,\frac{1}{2};\,-\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{4}\,|f_1(\theta)+f_0(\theta)|^2\,,$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2}\,\frac{1}{2};\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\right)=\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2}\,\frac{1}{2};\,-\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2}\right)=0\,;$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2};\,-\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2}\right)=|f_1(\theta)|^2\,,$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2};\,\frac{1}{2},\,\frac{1}{2}\right)=\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2};\,-\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\right)$$
$$=\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2};\,\frac{1}{2},\,-\frac{1}{2}\right)=0\,.$$

Lấy trung bình theo các trạng thái phân cực spin ban đầu (i) và lấy tổng theo các trạng thái phân cực spin cuối (f), ta thu được

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{1}{4}\sum_{S_{Pz}^{(i)},S_{Tz}^{(i)}}\ \sum_{S_{Pz}^{(f)},S_{Tz}^{(f)}}\frac{d\sigma}{d\Omega}\,(S_{Pz}^{(i)}\,S_{Tz}^{(i)};\,S_{Pz}^{(f)}\,S_{Tz}^{(f)})$$
$$=\frac{1}{4}\,[3f_1^2(\theta)+f_0^2(\theta)]=\frac{12A^2m^2}{\mu^2+4k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}}\,.$$

6032

Hãy tính trong gần đúng Born tiết diện tán xạ vi phân của quá trình tán xạ nơtron - nơtron, giả thiết rằng thế tương tác gây ra tán xạ bằng 0 với trạng thái spin tam tuyến và bằng $V(r)=V_0\frac{e^{-\mu r}}{r}$ với trạng thái spin đơn tuyến. [Tính tiết diện tán xạ với trạng thái ban đầu không phân cực (định hướng spin ngẫu nhiên)]

(Berkeley)

Lời giải:

Gần đúng Born cho ta (**Bài tập 6013**)

$$f_s(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty rV(r)\sin qr\,dr$$
$$=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty V_0\,e^{-\mu r}\sin qr\,dr$$

$$= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\frac{q}{q^2+\mu^2}, \quad q = 2k\sin(\theta/2),$$

trong đó k là vectơ sóng của chuyển động tương đối của các nơtron, $m = m_n/2$ là khối lượng rút gọn.

Vì hàm sóng spin của trạng thái spin đơn tuyến phản đối xứng, nên hàm sóng không gian của nó phải là đối xứng. Vì vậy

$$\begin{aligned}
\sigma_s &= |f(\theta) + f(\pi-\theta)|^2 \\
&= \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4}\left[\frac{1}{\mu^2+4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}} + \frac{1}{\mu^2+4k^2\cos^2\frac{\theta}{2}}\right]^2 \\
&= \frac{16m^2V_0^2(\mu^2+2k^2)^2}{\hbar^4\left(\mu^2+4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^2\left(\mu^2+4k^2\cos^2\frac{\theta}{2}\right)^2}.
\end{aligned}$$

Do các nơtron ban đầu không phân cực nên tiết diện tán xạ là

$$\begin{aligned}
\sigma(\theta) &= \frac{1}{4}\sigma_s + \frac{3}{4}\sigma_t = \frac{1}{4}\sigma_s \\
&= \frac{4m^2V_0^2(\mu^2+2k^2)^2}{\hbar^4\left(\mu^2+4k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}\right)^2\left(\mu^2+4k^2\cos^2\dfrac{\theta}{2}\right)^2}.
\end{aligned}$$

6033

Quá trình tán xạ của các neutron năng lượng thấp với các proton phụ thuộc vào spin. Khi hệ nơtron - proton ở trạng thái spin đơn tuyến thì tiết diện tán xạ $\sigma_1 = 78\times10^{-24}$ cm^2, trong khi đó với trạng thái spin tam tuyến, tiết diện tán xạ là $\sigma_3 = 2\times10^{-24}$ cm^2. Gọi f_1 và f_3 là các biên độ tán xạ tương ứng. Hãy tính các đại lượng sau đây theo f_1 và f_3.

(a) Tiết diện tán xạ toàn phần đối với trường hợp nơtron không phân cực tán xạ với proton không phân cực.

(b) Giả sử một nơtron ban đầu có spin hướng lên tán xạ trên một proton ban đầu có spin hướng xuống. Xác suất để nơtron và proton đổi chiều spin của chúng bằng bao nhiêu? (Giả thiết chỉ có tán xạ sóng s).

(c) Phân tử H_2 tồn tại ở 2 dạng: hydro thuận trong đó spin toàn phần của các proton là 1 và hydro nghịch trong đó spin toàn phần của các proton là

0. Bây giờ giả sử một nơtron có năng lượng rất thấp ($\lambda_n \gg \langle d \rangle$, khoảng cách trung bình giữa hai proton trong phân tử) tán xạ trên các phân tử hydro nói trên. Tỉ số giữa tiết diện tán xạ trong quá trình tán xạ của nơtron không phân cực với hydro thuận và tiết diện tán xạ trong quá trình tán xạ của chúng với hydro nghịch bằng bao nhiêu?

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Các trạng thái spin tam tuyến và đơn tuyến của hệ nơtron - proton có thể được biểu diễn lần lượt như sau

$$\chi_1^3 = \alpha_n \alpha_p , \qquad \chi_0^3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_n \beta_p + \alpha_p \beta_n), \qquad \chi_{-1}^3 = \beta_n \beta_p ,$$
$$\chi_{-1}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_n \beta_p - \alpha_p \beta_n) ,$$

với $\alpha = \binom{1}{0}$, $\beta = \binom{0}{1}$. Nếu ta định nghĩa toán tử $\hat{f}$ như sau

$$\hat{f} = \frac{3}{4} f_3 + \frac{1}{4} f_1 + \frac{1}{4} (f_3 - f_1) (\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_p) ,$$

thì bởi vì

$$\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_p = \sigma_{nx}\sigma_{px} + \sigma_{ny}\sigma_{py} + \sigma_{nz}\sigma_{pz} ,$$
$$\sigma_x \alpha = \beta, \qquad \sigma_y \alpha = i\beta, \qquad \sigma_z \alpha = \alpha ,$$
$$\sigma_x \beta = \alpha, \qquad \sigma_y \beta = -i\alpha, \qquad \sigma_z \beta = -\beta ,$$

nên ta có

$$\hat{f}\chi_1^3 = f_3 \chi_1^3 , \qquad \hat{f}\chi_0^3 = f_3 \chi_0^3 \qquad \hat{f}\chi_{-1}^3 = f_3 \chi_{-1}^3 ,$$
$$\hat{f}\chi_{-1}^1 = f_1 \chi_{-1}^1 ,$$

nghĩa là các trị riêng của toán tử $\hat{f}$ ứng với các trạng thái spin tam tuyến và đơn tuyến lần lượt là f_3 và f_1. Tương tự, nếu ta định nghĩa

$$\hat{f}^2 = \frac{3}{4} f_3^2 + \frac{1}{4} f_1^2 + \frac{1}{4} (f_3^2 - f_1^2) (\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_p)$$

thì $\hat{f}^2$ có các trị riêng f_3^2 và f_1^2 ứng với các trạng thái tam tuyến và đơn tuyến, và ta có thể biểu diễn tiết diện tán xạ toàn phần của quá tình tán xạ như là $\sigma_t = 4\pi \hat{f}^2$. Giả sử trạng thái spin của nơtron tới là

$$\begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos \beta \\ e^{i\alpha} \sin \beta \end{pmatrix} .$$

Chú ý ở đây (2β, 2α) là các góc cực của hướng spin của nơtron. Nếu trạng thái của proton phân cực là $\binom{1}{0}$, thì tiết diện sẽ là

$$\sigma_t = 4\pi \begin{pmatrix} e^{-i\alpha}\cos\beta \\ e^{i\alpha}\sin\beta \end{pmatrix}_n^+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p^+ \hat{f}^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \begin{pmatrix} e^{-i\alpha}\cos\beta \\ e^{i\alpha}\sin\beta \end{pmatrix}_n .$$

Vì

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p^+ (\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_p) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \\ &= (1 \ \ 0)_p \left[\sigma_{nx} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p + i\sigma_{ny} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p + \sigma_{nz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p\right] \\ &= \sigma_{nz} , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} e^{-i\alpha}\cos\beta \\ e^{i\alpha}\sin\beta \end{pmatrix}_n^+ \sigma_{nz} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha}\cos\beta \\ e^{i\alpha}\sin\beta \end{pmatrix}_n \\ &= (e^{i\alpha}\cos\beta \quad e^{-i\alpha}\sin\beta)_n \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha}\cos\beta \\ e^{i\alpha}\sin\beta \end{pmatrix}_n \\ &= (e^{i\alpha}\cos\beta \quad e^{-i\alpha}\sin\beta)_n \begin{pmatrix} e^{-i\alpha}\cos\beta \\ -e^{-i\alpha}\sin\beta \end{pmatrix}_n \\ &= \cos^2\beta - \sin^2\beta = \cos 2\beta , \end{aligned}$$

ta có

$$\begin{aligned} \sigma_t &= \pi\left\{3f_3^2 + f_1^2 - (f_3^2 - f_1^2)\cos 2\beta\right\} \\ &= \left\{\frac{3}{4}\sigma_3 + \frac{1}{4}\sigma_1 - (\sigma_3 - \sigma_1)\frac{\cos 2\beta}{4}\right\} . \end{aligned}$$

Vì các nơtron tới không phân cực, $\overline{\cos 2\beta} = 0$ nên

$$\sigma_t = \frac{3}{4}\sigma_3 + \frac{1}{4}\sigma_1 .$$

Bởi vì hướng của trục z là bất kì, tiết diện tán xạ toàn phần của các proton không phân cực cũng bằng tiết diện tán xạ toàn phần của các proton phân cực.

(b) Vectơ trạng thái trước tương tác là

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p .$$

Ta có thể khai triển vectơ trạng thái này theo các hàm sóng của các trạng thái đơn tuyến và tam tuyến

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right] + \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right]\right\} .$$

Do đó, sóng tán xạ là

$$\begin{aligned}
&\frac{e^{ikr}}{r}\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{f_s\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right]\right.\\
&\quad\left. + f_1\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right]\right\}\\
&\quad = \frac{e^{ikr}}{r}\left\{\frac{f_3+f_1}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p + \frac{f_3-f_1}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right\} .
\end{aligned}$$

Vậy, xác suất để cả nơtron và proton đều đảo chiều spin là

$$\frac{(f_3-f_1)^2}{(f_3+f_1)^2+(f_3-f_1)^2} = \frac{1}{2}\,\frac{(f_3-f_1)^2}{f_3^2+f_1^2} .$$

(c) Đặt

$$\hat{F} = \hat{f}_1 + \hat{f}_2 = \frac{3f_3+f_1}{2} + \frac{1}{2}(f_3-f_1)\,\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\mathbf{S}$$

với

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_{p_1}+\boldsymbol{\sigma}_{p_2}) = (\mathbf{s}_{p_1}+\mathbf{s}_{p_2}) .$$

Vì

$$\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z ,$$

$$\sigma_y\sigma_z = i\sigma_x ,$$

$$\sigma_z\sigma_x = i\sigma_y ,$$

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij} ,$$

nên ta có

$$(\sigma_n \cdot \mathbf{S})^2 = \mathbf{S}^2 - \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \mathbf{S},$$

và vì thế

$$\hat{F}^2 = \frac{1}{4}\{(3f_3 + f_1)^2 + (5f_3^2 - 2f_1 f_3 - 3f_1^2)\,\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \mathbf{S} + (f_3 - f_1)^2\,\mathbf{S}^2\}.$$

Với hydro nghịch, $S = 0$ và do vậy

$$\sigma_P = \pi\,(3f_3 + f_1)^2.$$

Trong trường hợp này, vì không có hướng nào là hướng ưu tiên nên tiết diện tán xạ không phụ thuộc vào phân cực ban đầu của các neutron tới.

Với hydro thuận, $S^2 = 1(1+1) = 2$. Chọn các trạng thái proton là $\binom{1}{0}_{p1}\binom{1}{0}_{p2}$, và sử dụng

$$\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_{p_1} + \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_{p_2})$$

dựa vào những tính toán ở phần (a) ta có

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S} = \cos 2\beta.$$

Vậy

$$\sigma_0 = \pi\{(3f_3 + f_1)^2 + (5f_3^2 - 2f_1 f_3 - 3f_1^2)\cos 2\beta + 2(f_3 - f_1)^2\}.$$

trong đó 2β là góc giữa $\mathbf{S}$ và $\boldsymbol{\sigma}_n$. Nếu các neutron không phân cực, $\overline{\cos 2\beta} = 0$ vì thế

$$\sigma_0 = \pi\,[(3f_3 + f_1)^2 + 2(f_3 - f_1)^2].$$

Kết quả này không phụ thuộc vào phân cực của hydro. Tỉ số ta cần tính là

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_P} = 1 + 2(f_3 - f_1)^2/(f_1 + 3f_3)^2.$$

6034

Xét một quá trình tán xạ nơtron – nơtron tại năng lượng bằng 0. Thế tương tác là

$$V(r) = \begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 V_0, & r \le a, \\ 0, & r > a, \end{cases}$$

trong đó $\boldsymbol{\sigma}_1$ và $\boldsymbol{\sigma}_2$ là các ma trận Pauli của hai nơtron. Hãy tính tiết diện tán xạ toàn phần. Cả nơtron tới và bia đều không phân cực.

(*CUS*)

Lời giải:

Xét bài toán trong biểu diễn các spin liên kết. Đặt

$$\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2 .$$

Khi đó

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 &= \frac{1}{2}(4S^2 - \sigma_1^2 - \sigma_2^2) \\ &= \frac{1}{2}[4S(S+1) - 3 - 3] \\ &= 2S(S+1) - 3 ,\end{aligned}$$

trong đó $S = 1$ hoặc 0. Lưu ý là trạng thái riêng của S cũng là trạng thái riêng của $V(r)$. Với quá trình tán xạ ở năng lượng 0, ta chỉ cần xét sóng riêng phần s, đối xứng theo các tọa độ không gian. Khi đó nguyên lý Pauli đòi hỏi hàm sóng spin phải phản đối xứng. Vì vậy, ta có $S = 0$ và

$$\mathbf{V} = \begin{cases} -3V_0, & r < a , \\ 0, & r > a . \end{cases}$$

Với sóng s, phương trình sóng với $r < a$ là

$$\frac{d^2u}{dr^2} + k_0^2 u = 0 ,$$

trong đó $u(r) = r\psi$, ψ là hàm sóng xuyên tâm, $k_0^2 = 6mV_0/\hbar^2$, và nghiệm của phương trình trên là $u(r) = A\sin(k_0 r)$. Với $r > a$, phương trình sóng là

$$\frac{d^2u}{dr^2} + k_1^2 u = 0 ,$$

trong đó $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, và nghiệm của nó là $u(r) = \sin(k_1 r + \delta_0)$.

Tính chất liên tục của u và u' tại $r = a$ cho ta

$$k_1 \tan(k_0 a) = k_0 \tan(k_1 a + \delta_0) .$$

Khi $E \to 0$, $k_1 \to 0$ thì

$$\frac{k_1}{k_0} \tan(k_0 a) = \frac{\tan(k_1 a) + \tan\delta_0}{1 - \tan(k_1 a)\tan\delta_0}$$
$$\to k_1 a + \tan\delta_0 ,$$

nghĩa là,

$$\delta_0 \approx k_1 a \left[\frac{\tan(k_0 a)}{k_0 a} - 1\right] .$$

Với quá trình va chạm của các hạt đồng nhất,

$$\sigma(\theta) = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2$$
$$= \frac{1}{k_1^2} \left| \sum_{l=0,2,4} 2(2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \right|^2 .$$

Chỉ xét sóng riêng phần s, ta có tiết diện tán xạ vi phân

$$\sigma(\theta) = \frac{4}{k_1^2} \sin^2\delta_0 \approx \frac{4}{k_1^2}\delta_0^2$$

và tiết diện tán xạ toàn phần

$$\sigma_t = 4\pi\sigma = 16\pi a^2 \left[\frac{\tan(k_0 a)}{k_0 a} - 1\right]^2 .$$

Vì các nơtron tới và bia đều không phân cực nên xác suất để $S = 0$ (nghĩa là, các spin đối nhau) là $\frac{1}{4}$. Vậy,

$$\sigma_t = 4\pi a^2 \left[\frac{\tan(k_0 a)}{k_0 a} - 1\right]^2 .$$

6035

Một chùm hạt có spin 1/2 và khối lượng m tán xạ trên một bia gồm các hạt nhân nặng cũng có spin 1/2. Tương tác giữa một hạt tới và một hạt nhân là $c\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \delta^3(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$, trong đó c là một hằng số nhỏ, $\mathbf{s}_1$ và $\mathbf{s}_2$ lần lượt là spin của hạt tán xạ và hạt nhân, còn $\mathbf{x}_1$ và $\mathbf{x}_2$ tương ứng là tọa độ của chúng.

(a) Hãy tính tiết diện tán xạ vi phân, lấy trung bình theo các trạng thái spin ban đầu. Tiết diện tán xạ toàn phần bằng bao nhiêu?

(b) Nếu các hạt tán xạ đi tới đều có spin hướng lên dọc theo trục z nhưng spin của các hạt nhân lại định hướng ngẫu nhiên thì xác suất để sau tán xạ các hạt tán xạ vẫn có spin hướng lên dọc theo trục z là bao nhiêu?

(Princeton)

Lời giải:

(a) Vì bia hạt nhân nặng và có vai trò như một tâm tán xạ cố định, nên hệ quy chiếu khối tâm và hệ quy chiếu phòng thí nghiệm trùng nhau. Vậy, phương trình của chuyển động tương đối là

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2 + c\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \delta^{(3)}(\mathbf{r})\right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) .$$

Vì c là hằng số nhỏ, ta có thể áp dụng gần đúng Born

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} c\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \delta^{(3)}(\mathbf{r}')\, d^3r' \\ &= -\frac{cm}{2\pi\hbar^2}\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 , \end{aligned}$$

ở đây ta đã sử dụng tính chất của hàm $\delta^{(3)}(\mathbf{r}')$. Tiết diện tán xạ vi phân là

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{c^2m^2}{(2\pi\hbar^2)^2} |\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2|^2 ,$$

trong đó

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 &= \frac{1}{2}[\mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_1^2 - \mathbf{s}_2^2] \\ &= \frac{1}{2}\left[S(S+1) - \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}\right]\hbar^2 , \\ \mathbf{S} &= \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 . \end{aligned}$$

Với trạng thái có spin tổng cộng $S = 0$, ta có

$$\sigma(\theta) = \frac{c^2m^2}{(2\pi\hbar^2)^2}\left|\frac{1}{2}\cdot\left(-\frac{3}{2}\right)\hbar^2\right|^2 = \frac{(3mc)^2}{(8\pi)^2} .$$

Còn với $S = 1$,

$$\sigma_1(\theta) = \frac{c^2m^2}{(2\pi\hbar^2)^2}\left|\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}\hbar^2\right|^2 = \frac{(mc)^2}{(8\pi)^2} .$$

Lấy trung bình theo các trạng thái spin ban đầu, tiết diện tán xạ vi phân là

$$\sigma_t(\theta) = \frac{1}{4}\sigma_0(\theta) + \frac{3}{4}\sigma_1(\theta) = \frac{3(mc)^2}{(8\pi)^2}\,.$$

Một cách giải khác:

Kí hiệu $|\alpha_p\rangle$ là trạng thái spin ban đầu của hạt tới. Spin của bia không phân cực, vì vậy trạng thái của nó là "hỗn hợp" (chứ không phải "chồng chất") của các trạng thái $|\alpha\rangle$ và $|\beta\rangle$, $c_1(t)\,|\alpha_N\rangle + c_2(t)\,|\beta_N\rangle$, ở đây $c_1(t)$ và $c_2(t)$ không có hiệu số pha xác định, và vì vậy giá trị bình phương trung bình của mỗi đại lượng đó là 1/2. Trong biểu diễn spin liên kết, trạng thái spin ban đầu là hỗn hợp của các trạng thái

$$c_1(t)|\,\chi\rangle,\ \frac{c_2(t)}{\sqrt{2}}\,(|\chi_0^1\rangle + |\chi_0^0\rangle)\,,$$

trong đó $$|\chi\rangle = |\alpha_p\rangle\,|\alpha_N\rangle\,,$$

$$|\chi_0^1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(|\alpha_p\rangle\,|\beta_N\rangle + |\beta_p\rangle|\alpha_N\rangle)\,,$$

$$|\chi_0^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(|\alpha_p\rangle\,|\beta_N\rangle - |\beta_p\rangle|\alpha_N\rangle)\,.$$

Sau khi tán xạ, trạng thái spin của hệ cùng phần tiệm cận của hàm sóng không gian, sẽ là

$$|\psi(S)\rangle_f = c_1(t)\,f_1(\theta)\,|\chi_1^1\rangle + \frac{c_2(t)}{\sqrt{2}}\,[f_1(\theta)\,|\chi_0^1\rangle + f_0(\theta)\,|\chi_0^0\rangle]\,.$$

Lấy tích vô hướng của các trạng thái $|\chi\rangle$ khác nhau với $|\psi\rangle_f$, ta thu được các biên độ tán xạ tương ứng. Các đại lượng này sau đó sẽ được cộng lại để thu được tiết diện tán xạ toàn phần

$$\sigma_t(\theta) = |c_1(t)|^2\,\sigma_1(\theta) + \frac{1}{2}\,|c_2(t)|^2\,\sigma_1(\theta) + \frac{1}{2}\,|c_2(t)|^2\,\sigma_0(\theta)\,.$$

Vì $c_1(t)$, $c_2(t)$ đều có giá trị bình phương trung bình là 1/2, nên ta có

$$\begin{aligned}\sigma_t(\theta) &= \frac{1}{2}\sigma_1(\theta) + \frac{1}{4}\sigma_1(\theta) + \frac{1}{4}\sigma_0(\theta) \\ &= \frac{3}{4}\sigma_1(\theta) + \frac{1}{4}\sigma_0(\theta),\end{aligned}$$

Đây chính là kết quả đã thu được ở trên.

(b) Sau khi tán xạ, hai trạng thái spin cần xét của hệ là

$$|\chi_1^1\rangle \qquad \text{và} \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\chi_0^1\rangle + |\chi_0^0\rangle\right).$$

Lấy tích vô hướng của hai trạng thái trên với $|\psi_f\rangle$, ta thu được các biên độ tán xạ tương ứng. Vậy, tiết diện tán xạ là

$$\sigma^{(t)} = |c_1(t)|^2\,\sigma_1(\theta) + \frac{1}{4}|c_2(t)|^2\,|[f_1(\theta) + f_0(\theta)]|^2 .$$

Lấy trung bình theo tập hợp, ta có

$$\sigma^{(t)} = \frac{1}{2}\sigma_1(\theta) + \frac{1}{8}|f_1(\theta) + f_2(\theta)|^2 = \frac{m^2c^2}{(8\pi)^2}.$$

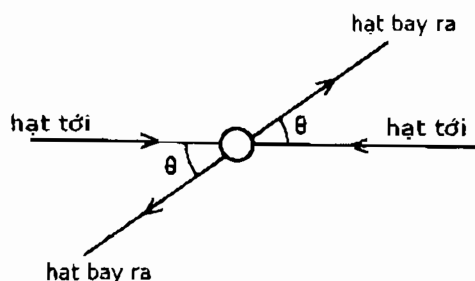
Xác suất để các hạt tán xạ vẫn có spin hướng lên là

$$P = \frac{\sigma^{(t)}}{\sigma_t} = \frac{1}{3}.$$

6036

(a) Hai hạt đồng nhất có spin 1/2 và khối lượng m tương tác với nhau thông qua thế Coulomb bị chắn $V(r) = e^2\exp(-\lambda r)/r$, trong đó $1/\lambda$ là độ dài chắn. Xét một thí nghiệm tán xạ trong đó mỗi hạt có động năng E trong hệ quy chiếu khối tâm. Giả sử E lớn. Các spin tới định hướng ngẫu nhiên. Hãy tính (trong hệ quy chiếu khối tâm) tiết diện tán xạ $\frac{\partial\sigma}{\partial\Omega}$ khi quan sát hạt bay ra theo phương tạo góc θ so với trục của các hạt đi tới như trong Hình 6.9.

(b) Giả sử các hạt bay ra được quan sát ở góc θ so với trục của chùm hạt tới, xác suất để sau tán xạ hai hạt nằm ở trạng thái với spin tổng cộng bằng 1



Hình 6.9

là bao nhiêu? Xác suất để nếu một hạt có spin hướng lên dọc theo trục z, thì hạt còn lại cũng có spin hướng lên theo trục z là bao nhiêu?

(c) Năng lượng cần phải lớn đến đâu để các gần đúng đang sử dụng cho kết quả tốt? Giả sử thay vì như vậy, năng lượng lại nhỏ hơn rất nhiều so với yêu cầu. Trong giới hạn năng lượng thấp, xác suất để sau tán xạ hai hạt ở trạng thái có $S = 1$ là bao nhiêu?

(*Princeton*)

Lời giải:

Trong hệ quy chiếu khối tâm, chuyển động của hai hạt có tính chất đối xứng. Tương tác giữa chúng tương đương với một thế có tâm nằm ở trung điểm của đoạn thẳng nối các hạt.

$$V(\rho) = e^2 \exp(-2\lambda\rho)/2\rho\,,$$

trong đó $\rho = \frac{r}{2}$, r là khoảng cách giữa hai hạt. Vì năng lượng E lớn, ta có thể sử dụng gần đúng Born bậc một

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}}V(\rho)\,d^3\rho \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \frac{e^2}{2}\exp(-2\lambda\rho)\,\sin(q\rho)\,d\rho \\ &= -\frac{me^2}{\hbar^2\left[q^2+(2\lambda)^2\right]}\,, \end{aligned}$$

trong đó $\mathbf{q}$ là xung lượng truyền trong quá trình tán xạ, $q = 2k\sin(\theta/2)$. Xét

tính đối xứng của hàm sóng hệ hai hạt đồng nhất, ta có

$$\text{với } S = 0, \qquad \sigma_s(\theta) = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2\,,$$
$$\text{với } S = 1, \qquad \sigma_a(\theta) = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2\,.$$

Vì vậy

$$\sigma_s(\theta) = \frac{1}{4}\left(\frac{me^2}{\hbar^2}\right)^2 \left[\frac{1}{k^2\sin^2\frac{\theta}{2} + \lambda^2} + \frac{1}{k^2\cos^2\frac{\theta}{2} + \lambda^2}\right]^2$$
$$= \frac{1}{4}\left(\frac{me^2}{\hbar^2}\right)^2 \left[\frac{k^2 + 2\lambda^2}{\left(k^2\sin^2\frac{\theta}{2} + \lambda^2\right)\left(k^2\cos^2\frac{\theta}{2} + \lambda^2\right)}\right]^2,$$
$$\sigma_a(\theta) = \frac{1}{4}\left(\frac{me^2}{\hbar^2}\right)^2 \left[\frac{k^2\cos\theta}{\left(k^2\sin^2\frac{\theta}{2} + \lambda^2\right)\left(k^2\cos^2\frac{\theta}{2} + \lambda^2\right)}\right]^2.$$

Vậy, tiết diện tán xạ toàn phần là

$$\sigma_t = \frac{1}{4}\sigma_s + \frac{3}{4}\sigma_a$$
$$= \frac{1}{16}\left(\frac{me^2}{\hbar^2}\right)^2 \frac{(k^2 + 2\lambda^2)^2 + 3(k^2\cos\theta)^2}{\left[\left(k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2} + \lambda^2\right)\left(k^2\cos^2\dfrac{\theta}{2} + \lambda^2\right)\right]^2}.$$

(b) Nếu hạt tới không phân cực, xác suất để sau tán xạ hai hạt ở trạng thái có spin toàn phần bằng 1 là

$$\frac{\frac{3}{4}\sigma_a}{\sigma_t} = \frac{3(k^2\cos\theta)^2}{(k^2 + 2\lambda^2)^2 + 3(k^2\cos\theta)^2}.$$

Xác suất để sau tán xạ cả hai hạt có spin hướng lên theo trục z là

$$\frac{\frac{1}{4}\sigma_a}{\sigma_t} = \frac{(k^2\cos\theta)^2}{(k^2 + 2\lambda^2)^2 + 3(k^2\cos\theta)^2}.$$

(c) Sóng riêng phần với $\ell = 0$ có tính chất đối xứng $f(\theta) = f(\pi - \theta)$. Nó không cho đóng góp nào vào trạng thái $S = 1$, trong khi lại là thành phần đóng góp chủ yếu vào trạng thái $S = 0$. Vì vậy, tỉ số giữa tiết diện tán xạ của

trạng thái có $S = 1$ với trạng thái có $S = 0$ bằng tỉ số giữa tiết diện tán xạ của sóng riêng phần với $\ell = 1$ và sóng riêng phần với $\ell = 0$. Tỉ số này tiến tới 0 trong giới hạn năng lượng thấp.

6037

Một electron (khối lượng m) có xung lượng p tán xạ với góc θ trên một thế phụ thuộc spin (và vi phạm tính chẵn lẻ) $V = e^{-\mu r^2}(A + B\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r})$, trong đó $\mu > 0$, A, B là các hằng số và σ_x, σ_y, σ_z là các ma trận spin Pauli thông thường. Gọi $\frac{\partial\sigma_i}{\partial\Omega}$ là tiết diện tán xạ vi phân, được lấy tổng theo các trạng thái spin cuối nhưng với trạng thái spin ban đầu xác định, kí hiệu bởi chỉ số i của electron tới. Cụ thể là, chọn trục lượng tử hoá của các spin là đường thẳng quỹ đạo của electron tới, ta có thể có các lựa chọn sau: spin tới "hướng lên"($i =\uparrow$) hay hướng "xuống" ($i =\downarrow$).

Tính $\frac{\partial\sigma_\uparrow}{\partial\Omega}$ và $\frac{\partial\sigma_\downarrow}{\partial\Omega}$ như các hàm của p và θ trong gần đúng Born bậc thấp nhất.

(Princeton)

Lời giải:

Chọn hướng quỹ đạo của electron tới là trục x. Trong biểu diễn chéo của σ_z, hàm sóng spin của electron tới có thể được viết dưới dạng

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \qquad \text{hay} \qquad \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}.$$

Gọi $\mathbf{n}$ là vectơ đơn vị dọc theo hướng $\mathbf{r}$, nghĩa là, $\mathbf{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$. Khi đó

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n} = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\sin\theta\cos\varphi + \begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}\sin\theta\sin\varphi + \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\cos\theta = \begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi}\\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}.$$

Trước hết ta xét ψ_+

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n})\,\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\cos\theta + \sin\theta\, e^{-i\varphi}\\ \sin\theta\, e^{i\varphi} - \cos\theta\end{pmatrix}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos\theta + \sin\theta\, e^{-i\varphi})\,\alpha + \frac{1}{\sqrt{2}}(\sin\theta\, e^{i\varphi} - \cos\theta)\,\beta\,,$$

trong đó $\alpha = \binom{1}{0}$, $\beta = \binom{0}{1}$ là các trạng thái riêng của σ_z trong biểu diễn Pauli. Trong gần đúng Born bậc một biên độ tán xạ (đã tính tới spin) được cho bởi

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}\,V(\mathbf{r}')\,\psi_+\,d^3x'\,,$$

trong đó $\mathbf{q} = \frac{1}{\hbar}(\mathbf{p}_f - \mathbf{p})$, $|\mathbf{q}| = q = \frac{2p}{\hbar}\sin(\theta/2)$. Ta có thể viết biên độ trên dưới dạng

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-iqr'\cos\theta'}\,e^{-\mu r'^2}$$
$$\times\,[A\psi_+ + r'B\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n})\,\psi_+]\,d^3x' = I_1(\theta)\,\alpha + I_2(\theta)\,\beta\,,$$

trong đó

$$I_1(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-iqr'\cos\theta'}\,e^{-\mu r'^2}\,\frac{1}{\sqrt{2}}$$
$$\times\,[A + r'B\,(\cos\theta' + \sin\theta'\,e^{-i\varphi'})]\,r'^2\,\sin\theta'\,dr'\,d\theta'\,d\varphi'\,,$$
$$I_2(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\,\frac{B}{\sqrt{2}}\int e^{-iqr'\cos\theta'}\,e^{-\mu r'^2}\,(\sin\theta'\,e^{i\varphi'} - \cos\theta')\,r'^3$$
$$\times\,\sin\theta'\,dr'\,d\theta'\,d\varphi'\,.$$

Vì

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm i\varphi'}\,d\varphi' = 0\,,$$

nên ta có

$$I_1(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} e^{-iqr'\cos\theta'}\,e^{-\mu r'^2}\,\frac{1}{\sqrt{2}}$$
$$\times\,(A + r'B\cos\theta')\,r'^2\,\sin\theta'\,d\theta'\,dr'\,,$$

hay là, bằng cách lấy tích phân theo θ', ta được

$$I_1(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\cdot\frac{A}{\sqrt{2}}\int_0^\infty r' e^{-\mu r'^2}\sin(qr')\,dr' - \frac{2mi}{\hbar^2 q}$$
$$\times\frac{3}{\sqrt{2}}\int_0^\infty r'^2 e^{-\mu r'^2}\cos(qr')\,dr'$$
$$+\frac{2mi}{\hbar^2 q^2}\cdot\frac{B}{\sqrt{2}}\int_0^\infty r' e^{-\mu r'^2}\sin(qr')\,dr'.$$

Vì

$$f(\mu, q) = \int_0^\infty e^{-\mu r'^2}\cos(qr')\,dr' = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right),$$

nên ta có

$$\frac{\partial f}{\partial q} = -\int_0^\infty r' e^{-\mu r'^2}\sin(qr')\,dr' = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)\left(\frac{-2q}{4\mu}\right).$$

hay

$$\int_0^\infty r' e^{-\mu r'^2}\sin(qr')\,dr' = \sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\cdot\frac{q}{4\mu}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right),$$

đồng thời

$$\frac{\partial f}{\partial \mu} = -\int_0^\infty r'^2 e^{-\mu r'^2}\cos(qr')\,dr' = \sqrt{\frac{\pi}{\mu}}$$
$$\times\left(-\frac{1}{4\mu}\right)\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right) + \frac{q^2}{8\mu^2}\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right),$$

hay

$$\int_0^\infty r'^2 e^{-\mu r'^2}\cos qr'\,dr' = \frac{1}{4\mu}\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu} - \frac{q^2}{8\mu^2}\right)$$
$$\times\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right).$$

Như vậy

$$
\begin{aligned}
I_1(\theta) = & -\frac{2m}{\hbar^2 q}\cdot\frac{A}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\cdot\frac{q}{4\mu}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right) \\
& -\frac{2mi}{\hbar^2 q}\frac{B}{\sqrt{2}}\cdot\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)\left(\frac{1}{4\mu}-\frac{q^2}{8\mu^2}\right) \\
& +\frac{2mi}{\hbar^2 q^2}\cdot\frac{B}{\sqrt{2}}\cdot\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)\cdot\frac{q}{4\mu} \\
= & \sqrt{\frac{\pi}{2\mu}}\cdot\frac{m}{2\hbar^2\mu}\left(-A+i\frac{Bq}{2\mu}\right)\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right).
\end{aligned}
$$

Do đó

$$
\frac{\partial\sigma_\uparrow}{\partial\Omega} = |I_1(\theta)|^2 = \frac{\pi m^2}{8\mu^3\hbar^4}\exp\left(-\frac{q^2}{2\mu}\right)\left(A^2+\frac{q^2B^2}{4\mu^2}\right).
$$

Tương tự ta thu được

$$
\begin{aligned}
I_2(\theta) = & -\frac{mA}{2\hbar^2\mu}\sqrt{\frac{\pi}{2\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right) \\
& -\frac{imBq}{4\hbar^2\mu^2}\sqrt{\frac{\pi}{2\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right),
\end{aligned}
$$

vì thế

$$
\frac{\partial\sigma_\downarrow}{\partial\Omega} = |I_2(\theta)|^2 = \frac{\mu m^2}{8\mu^3\hbar^4}\exp\left(-\frac{q^2}{2\mu}\right)\left(A^2+\frac{q^2B^2}{4\mu^2}\right).
$$

Với ψ_-, ta cũng thu được những kết quả này.

6038

Một hạt mang điện P_1 có spin bằng 0 được liên kết ở trạng thái có đối xứng cầu mà hàm sóng của nó là $\psi_1(\mathbf{r}) = (\pi a)^{-3/2}e^{-r^2/2a^2}$. Giả sử có một hạt P_2 phi tương đối tính có spin bằng 0 và tương tác với P_1 thông qua thế tiếp xúc $V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = V_0 b^3\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$, hãy tính trong gần đúng Born bậc một biên độ của tán xạ đàn tính giữa P_2 và trạng thái liên kết nói trên của P_1 (không cần phải chuẩn hoá). Giả thiết rằng P_1 đủ nặng để năng lượng chuyển động giật lùi của nó có thể bỏ qua, hãy vẽ phân bố góc $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ của các hạt bị tán xạ. Dạng

của nó sẽ thay đổi thế nào theo năng lượng tán xạ? Có thể dựa vào đó để xác định kích thước của trạng thái liên kết P_1 không? Đại lượng nào quyết định giá trị nhỏ nhất cần có của P_2 để đo được kích thước này?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Bởi vì P_1 rất nặng và do vậy có thể xem như là đứng yên, phương trình Schrödinger của P_2 là

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \int d\mathbf{r}'\rho_1(\mathbf{r}')\,V_0\,b^3\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}),$$

hay

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_0 b^3\rho_1(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}),$$

trong đó $\rho_1(\mathbf{r}) = |\psi_1(\mathbf{r})|^2$ là mật độ xác suất để hạt P_1 ở vị trí $\mathbf{r}$ và m là khối lượng của P_2. Khi đó dùng gần đúng Born ta có

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r' V_0 b^3 \rho_1(r')\sin(qr')\,dr'\,|\,.$$

Như vậy

$$\begin{aligned} f(\theta) &\propto \frac{1}{q}\left(\frac{b}{a}\right)^3\int_0^\infty r'\exp\left(-\frac{r'^2}{a^2}\right)\sin(qr')\,dr' \\ &\propto b^3\exp\left[-\frac{1}{4}(qa)^2\right], \end{aligned}$$

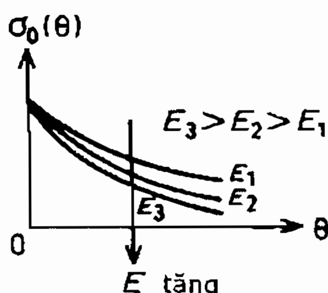
và vì thế

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta)|^2 = \sigma_0\exp\left[-\frac{1}{2}(qa)^2\right] \\ &= \sigma_0\exp\left[-2(ka)^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right], \end{aligned}$$

trong đó $k = \frac{p}{\hbar}$, $\sigma_0 = \sigma(\theta = 0)$. Sự phụ thuộc của $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ vào θ với các năng lượng khác nhau được biểu diễn trong Hình 6.10.

Khi năng lượng hạt tới tăng lên, $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ sẽ giảm nhanh hơn khi θ tăng. Vì

$$\ln\frac{d\sigma}{d\Omega} = -2k^2a^2\sin^2\frac{\theta}{2} + c,$$



Hình 6.10

trong đó c là một hằng số, đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của $\ln \frac{d\sigma}{d\Omega}$ theo $\sin^2(\theta/2)$ sẽ là một đường thẳng với hệ số góc $-2k^2a^2 = -2\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 a^2$, và có thể được dùng để xác định kích thước a của trạng thái liên kết P_1. Biểu thức của $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ không áp đặt bất kì ràng buộc nào đối với năng lượng tới, ngoại trừ việc phải quan tâm tới giới hạn để áp dụng được gần đúng Born. Trên thực tế (**Bài tập 6026**), để áp dụng được gần đúng Born ta cần có

$$\frac{\hbar^2 k}{ma} \gg |V| \sim V_0 \left(\frac{b}{a}\right)^3 ,$$

nghĩa là,

$$k_{\min} \sim \frac{mb^3 V_0}{\hbar^2 a^2} .$$

6039

(a) Phát biểu các quy tắc chọn lọc đối với chuyển dời lưỡng cực điện giữa các trạng thái của nguyên tử trong các quá trình bức xạ hay hấp thụ một photon.

(b) Đưa ra các quy tắc chọn lọc dựa vào mômen xung lượng quỹ đạo, spin, tính xoắn và tính chẵn lẻ của photon.

(c) Tính theo phương pháp bán cổ điển thời gian sống của trạng thái $2p$ của nguyên tử hydro, sử dụng mô hình Bohr và công thức cổ điển

$$P = \frac{2}{3}\frac{q^2}{c^3}\dot{v}^2 \qquad \text{(hệ đơn vị c.g.s.)}$$

đối với công suất bức xạ bởi một hạt điện tích q và có gia tốc $\dot{v}$. Hãy biểu diễn

kết quả qua e, $\hbar$, c, a và ω, trong đó a là bán kính Bohr và ω là vận tốc góc trên quỹ đạo tròn.

(d) Theo kết quả của câu (c), bề rộng của mức $2p$ theo đơn vị electron vôn bằng bao nhiêu?

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Các quy tắc chọn lọc là

$$\Delta l = \pm 1, \qquad \Delta m = \pm 1, 0 .$$

(b) Photon có mômen xung lượng bằng 0, spin 1, độ xoắn ± 1, và tính chẵn lẻ âm. Vì mômen xung lượng được bảo toàn, ta có

$$\Delta l = 0, \pm 1, \qquad \Delta m = \pm 1, 0 ,$$

trong khi đó sự bảo toàn tính chẵn lẻ đòi hỏi

$$(-1)^l = -(-1)^{l'}, \qquad \text{nghĩa là} \quad l \neq l' .$$

Vì vậy,

$$\Delta l = \pm 1, \qquad \Delta m = \pm 1, 0 .$$

(c) Theo lý thuyết cổ điển, công suất bức xạ bởi một electron có gia tốc $\dot{\mathbf{v}}$ là

$$P = \frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}|\dot{\mathbf{v}}|^2 .$$

Một electron chuyển động theo quỹ đạo tròn bán kính a có gia tốc

$$|\dot{\mathbf{v}}| = \omega^2 a ,$$

trong đó $\omega^2 a$ được cho bởi

$$\frac{e^2}{a^2} = m\omega^2 a .$$

Với trạng thái $2p$, $n = 2$, $l = 1$, vì vậy bán kính trung bình của quỹ đạo electron là

$$a = \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)] = 5a_0 ,$$

trong đó a_0 là bán kính Bohr. Ta cũng có thể thu được công thức này bằng cách lấy trực tiếp tích phân

$$a = \frac{\int R_{21}^2\, r \cdot r^2\, dr}{\int R_{21}^2 \cdot r^2\, dr} = 5a_0 ,$$

trong đó $R_{21} \propto r\ \exp(-\frac{r}{2a_0})$. Do đó, công suất bức xạ

$$P = \frac{2}{3}\,\frac{e^6}{(5a_0)^4 m^2 c^3}\,.$$

Khi chuyển xuống trạng thái cơ bản, hiệu hai mức năng lượng là

$$\Delta E = E_2 - E_1 = -\frac{e^2}{2a}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1}\right) = \frac{3e^2}{8a_0}\,.$$

Vì vậy, thời gian sống của mức $2p$ là

$$\begin{aligned} T = \Delta E/P &= \left(\frac{75}{4}\right)^2 \frac{a_0^3 m^2 c^3}{e^4} \\ &= \left(\frac{75}{4}\right)^2 \left(\frac{mc^2}{e^2}\right) \frac{a_0^3}{c} \\ &= \left(\frac{75}{4}\right)^2 \left(\frac{1}{2,82 \times 10^{-13}}\right)^2 \times \frac{(0,53 \times 10^{-8})^3}{3 \times 10^{10}} = 2,2 \times 10^{-8}\,s\,. \end{aligned}$$

(d) Độ rộng của mức $2p$ là

$$\Gamma = \hbar/T = 3,0 \times 10^{-8}\,\text{eV}\,.$$

6040

Các trạng thái của K meson trung hoà $|K^\circ\rangle$ và $|\bar{K}^\circ\rangle$ có thể biểu diễn theo các trạng thái $|K_L\rangle$, $|K_S\rangle$

$$|K^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|K_L\rangle + |K_S\rangle\right),$$

$$|\bar{K}^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|K_L\rangle - |K_S\rangle\right),$$

trong đó $|K_L\rangle$ và $|K_S\rangle$ là các trạng thái với thời gian sống xác định $\tau_L = \frac{1}{\gamma_L}$ và $\tau_S = \frac{1}{\gamma_S}$ và năng lượng nghỉ khác nhau $m_L c^2 \neq m_S c^2$. Tại thời điểm $t = 0$, một meson được sinh ra ở trạng thái $|\psi(t=0)\rangle = |K^\circ\rangle$. Gọi xác suất tìm thấy hệ ở trạng thái $|K^\circ\rangle$ ở thời điểm t là $P_\circ(t)$ và xác suất tìm thấy hệ ở trạng thái

$|\bar{K}^\circ\rangle$ ở thời điểm t là $\bar{P}_\circ(t)$. Tính $P_0(t) - \bar{P}_0(t)$ theo γ_L, γ_S, m_Lc^2 và m_Sc^2. Bỏ qua sự vi phạm CP.

(*Columbia*)

Lời giải:

Giả sử K meson là một trạng thái bán giả bền với bề rộng Γ ở năng lượng ε_0. Trong khoảng năng lượng

$$E - E_0 - \frac{i}{2}\Gamma\,.$$

hàm sóng của nó có thể biểu diễn dưới dạng

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|K_L\rangle \exp\left[-i\left(m_Lc^2/\hbar - \frac{i}{2}\gamma_L\right)t\right]\right.\\ &\quad \left. + |K_S\rangle \exp\left[-i\left(m_Sc^2/\hbar - \frac{i}{2}\gamma_S\right)t\right]\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|K_L\rangle \exp(-im_Lc^2t/\hbar)\exp\left(-\frac{1}{2}\gamma_Lt\right)\right.\\ &\quad \left. + |K_S\rangle e^{-im_Sc^2t/\hbar}e^{-\gamma_St/2}\right].\end{aligned}$$

Xác suất để hạt ở trạng thái $|K^\circ\rangle$ tại thời điểm t là

$$\begin{aligned}\mathbf{P}_0(t) &= |\langle K^0|\psi(t)\rangle|^2\\ &= \frac{1}{4}\left|e^{-im_Lc^2t/\hbar}e^{-\gamma_Lt/2} + e^{-im_Sc^2t/\hbar}e^{-\gamma_St/2}\right|^2\\ &= \frac{1}{4}\left\{e^{-\gamma_Lt} + e^{-\gamma_St} + 2e^{-(\gamma_L+\gamma_S)t/2}\cos\left[(m_L - m_S)c^2t/\hbar\right]\right\},\end{aligned}$$

và xác suất để hạt nằm ở trạng thái $\bar{K}^\circ$ là

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{P}}_0(t) &= |\langle \bar{K}^0|\psi(t)\rangle|^2\\ &= \frac{1}{4}\left\{e^{-\gamma_Lt} + e^{-\gamma_St} - 2e^{-(\gamma_L+\gamma_S)t/2}\cos\left[(m_L - m_S)c^2t/\hbar\right]\right\}.\end{aligned}$$

Vì vậy

$$P_0(t) - \bar{P}_0(t) = e^{-(\gamma_L+\gamma_S)/2}\cos[m_L - m_S)c^2t/\hbar]\,.$$

6041

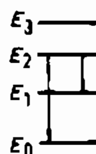
Các mức năng lượng của 4 trạng thái thấp nhất của một nguyên tử là

$$E_o = -14,0 \text{ eV},$$

$$E_1 = -9,0 \text{ eV},$$

$$E_2 = -7,0 \text{ eV},$$

$$E_3 = -5,5 \text{ eV}.$$



Hình 6.11

và các tốc độ chuyển dời A_{ij} (các hệ số Einstein) đối với quá trình chuyển dời $i \to j$ là

$$A_{10} = 3,0 \times 10^8\, s^{-1}, \quad A_{20} = 1,2 \times 10^8\, s^{-1}, \quad A_{30} = 4,5 \times 10^7\, s^{-1},$$

$$A_{21} = 8,0 \times 10^7\, s^{-1}, \quad A_{31} = 0, \quad A_{32} = 1,0 \times 10^7\, s^{-1}.$$

Giả sử có một bình chứa một số rất lớn nguyên tử ở mức năng lượng E_2.

(a) Tìm tỉ số giữa năng lượng bức xạ trong một đơn vị thời gian trong quá trình chuyển dời $E_2 \to E_0$ và quá trình chuyển dời $E_2 \to E_1$.

(b) Tính thời gian sống đối với bức xạ của mức E_2.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Năng lượng bức xạ trong một đơn vị thời gian được cho bởi $(E_i - E_j)\, A_{ij}$, và bởi vậy ta có tỉ số

$$\frac{E_2 - E_0}{E_2 - E_1} \cdot \frac{A_{20}}{A_{21}} = \frac{7}{2} \cdot \frac{12}{8} = 5,25.$$

(b) Một nguyên tử ở mức E_2 có thể chuyển xuống các mức E_0 hoặc E_1 do sự chuyển dời tự phát. Vì vậy, số nguyên tử đó bị giảm đi trong khoảng thời gian dt là

$$dN_2 = -(A_{20} + A_{21})\,N_2\,dt\,.$$

nghĩa là,

$$\frac{dN_2}{N_2} = -(A_{20} + A_{21})\,dt\,,$$

Hay là, bằng cách lấy tích phân, ta có

$$N_2 = N_{20}\,\exp\left[-(A_{20} + A_{21})\,t\right],$$

trong đó N_{20} là số nguyên tử ở mức năng lượng E_2 tại thời điểm $t = 0$. Vậy thời gian sống trung bình là

$$\begin{aligned}\tau &= \frac{1}{N_{20}}\int_{t=0}^{\infty} t(-dN_2) = (A_{20} + A_{21})\int_0^{\infty} t\,\exp\left[-(A_{20} + A_{21})\,t\right]dt \\ &= \frac{1}{A_{20} + A_{21}} = 5,0 \times 10^{-9}\,s\,.\end{aligned}$$

6042

Một nguyên tử hydro nằm ở mức kích thích thứ nhất ($2p$) được đặt vào trong một hốc. Với nhiệt độ ở trong hốc bằng bao nhiêu thì các xác suất chuyển dời trong quá trình bức xạ tự phát và bức xạ cảm ứng bằng nhau?

(*Berkeley*)

Lời giải:

Xác suất của quá trình chuyển dời cảm ứng trong một đơn vị thời gian của nguyên tử ở trong hốc là

$$w_{12} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2}\,|\mathbf{r}_{12}|^2\,\rho(\omega_{21})\,,$$

còn xác suất của quá trình chuyển dời tự phát của nguyên tử là

$$A_{12} = \frac{4e^2\omega_{21}^3}{3\hbar c^3}\,|\mathbf{r}_{12}|^2\,.$$

Nếu hai xác suất này bằng nhau, ta có

$$\frac{\pi^2}{\hbar}\,\rho(\omega_{21}) = \frac{\omega_{21}^3}{c^3}\,.$$

Đối với bức xạ của vật đen

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1},$$

ta có

$$\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{21}}{kT}\right) - 1} = 1,$$

và

$$T = \frac{\hbar\omega_{21}}{k \ln 2}.$$

Với

$$\omega_{21} = -\frac{me^4}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{2^2} - 1\right),$$

$$T = \frac{mc^2}{k}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{3}{8 \ln 2} = \frac{0,51 \times 10^6}{8,62 \times 10^{-5}}\left(\frac{1}{137}\right)^2 \frac{3}{8 \ln 2} = 1,71 \times 10^5 \, K.$$

6043

Một ngyên tử hydro (với electron và proton có spin bằng 0) ở trạng thái cơ bản được đặt giữa hai bản của tụ điện phẳng và chịu tác dụng của một điện trường đều và yếu

$$E = E_0 \, e^{-\Gamma t} \, \theta(t),$$

trong đó $\theta(t)$ là hàm bậc thang: $\theta(t) = 0$ với $t < 0$ và $\theta(t) = 1$ với $t > 0$. Tìm xác suất ở gần đúng bậc nhất để nguyên tử ở một trạng thái bất kì ứng với $n = 2$ trong một khoảng thời gian dài. Cho biết một số hàm sóng của nguyên tử hydro trong hệ toạ độ cầu

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \qquad \psi_{210} = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^3}} e^{-r/2a_0} \frac{r}{a_0} \cos\theta,$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0},$$

$$\psi_{21\pm1} = \mp \frac{1}{\sqrt{64\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin\theta \, e^{\pm i\phi}.$$

và một tích phân cần dùng $\int_0^\infty x^n \, e^{-ax} \, dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Chọn hướng của điện trường là dọc theo trục z. Khi đó, Hamiltonian nhiễu loạn có dạng

$$\hat{H}' = e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) = ezE(t) .$$

Các yếu tố ma trận khác 0 của H' phải là các yếu tố giữa các trạng thái có tính chẵn lẻ khác nhau. Vì vậy, $P(1s \to 2s) = 0$. Xét $P(1s \to 2p)$.

Trạng thái $2p$ suy biến bậc 3, nghĩa là,

$$|2p,\, m\rangle, \qquad \text{với} \quad m = 1,\, 0,\, -1 .$$

Để $\langle m'|z|m''\rangle$ khác 0, cần có $\Delta m = 0$. Vậy

$$\langle 2p,\, 1|H'|1s,\, 0\rangle = \langle 2p,\, -1|H'|1s,\, 0\rangle = 0 ,$$

và việc tìm xác suất của quá trình chuyển dời $1s \to 2p$ quy về việc tìm xác suất của quá trình chuyển dời $|1s,\, 0\rangle \to |2p,\, 0\rangle$. Vì

$$\begin{aligned}\langle 2p,\, 0|H'|1s,\, 0\rangle &= eE(t) \int \psi^*_{210}\, r\, \cos\theta\, \psi_{100}\, d\mathbf{r} \\ &= \frac{eE(t)}{4\sqrt{2}\,\pi a_0^4} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \exp\left(-\frac{3}{2} r/a_0\right) \\ &\quad \times r^4 \cos^2\theta \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi \\ &= \frac{eE(t)}{4\sqrt{2}\pi a_0^4}\, 2\pi \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{4!}{\left(\dfrac{3}{2a_0}\right)^5} = \frac{2^7\sqrt{2}\, a_0 e}{3^5}\, E(t) ,\end{aligned}$$

nên biên độ xác suất là

$$\begin{aligned}C_{2p0,1s0} &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle 2p,\, 0|H'|1s,\, 0\rangle\, e^{i\omega_{21}t}\, dt \\ &= \frac{1}{i\hbar}\, \frac{2^7\sqrt{2}\, a_0 e}{3^5}\, E_0 \int_0^\infty e^{-\Gamma t} e^{i\omega_{21}t}\, dt \\ &= \frac{2^7\sqrt{2}\, a_0 e E_0}{3^5 i\hbar} \cdot \frac{1}{\Gamma - i\omega_{21}} ,\end{aligned}$$

trong đó $\omega_{21} = \frac{1}{\hbar}(E_2 - E_1)$. Vậy, xác suất chuyển dời $|1s,\, 0\rangle \to |2p,\, 0\rangle$ là

$$P(1s \to 2p) = |C_{2p0,1s0}|^2 = \frac{2^{15} a_0^2 e^2 E_0^2}{3^{10}\hbar^2\left(\Gamma^2 + \omega_{21}^2\right)} .$$

Chú ý rằng

$$\omega_{21} = \frac{1}{\hbar}(E_2 - E_1) = \frac{e^2}{2a_0\hbar}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1}\right) = \frac{3e^2}{8a_0\hbar}.$$

6044

Một phân tử phân cực gồm có hai nguyên tử với khối lượng bằng nhau, mỗi nguyên tử có khối lượng là M, cách nhau một khoảng D, quay quanh một trục vuông góc với D và đi qua khối tâm của phân tử.

(a) Biểu diễn năng lượng của trạng thái quay của phân tử theo số lượng tử mômen xung lượng J theo các tính chất cơ học của nó.

(b) Tìm quy tắc chọn lọc của bức xạ lưỡng cực điện của phân tử từ một trong các trạng thái quay của nó?

(c) Xác định tần số bức xạ lưỡng cực điện do chuyển động quay của phân tử như một hàm của J. (Biểu diễn kết quả như là hàm của J, M, D và các hằng số vật lý).

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Vì $\hat{H} = \frac{1}{2I}\mathbf{J}^2$, trong đó J là toán tử mômen xung lượng toàn phần, $I = \frac{1}{2}MD^2$ là mômen quán tính của phân tử đối với trục quay, năng lượng của trạng thái quay với số lượng tử J là

$$E_J = \frac{1}{MD^2}J(J+1)\hbar^2.$$

(b) Các hàm riêng ứng với các trạng thái quay là các hàm cầu điều hoà. Chọn trục z trùng với hướng của điện trường và xét điều kiện để $\langle j''m''|\cos\theta|j'm'\rangle \neq 0$. Vì

$$\langle J''m''|\cos\theta|J'm'\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{(J'+1-m')(J'+1+m')}{(2J'+1)(2J'+3)}}\,\delta_{J'',J'+1}\,\delta_{m''m'}$$

$$+ \sqrt{\frac{(J'+m')(J'-m')}{(2J'+1)(2J'-1)}}\,\delta_{J'',J'-1}\,\delta_{m''m'},$$

ta có

$$\Delta J = j'' - j' = \pm 1 ,$$

$$\Delta m = m'' - m' = 0 .$$

(c) Đối với quá trình chuyển dời từ mức năng lượng J đến mức $J-1$, ta có

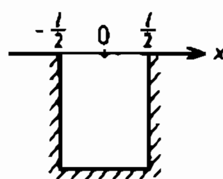
$$\hbar\omega = E_J - E_{J-1} = \frac{1}{MD^2} J(J+1)\hbar^2 - \frac{1}{MD^2}(J-1)J\hbar^2 = \frac{2J\hbar^2}{MD^2} ,$$

từ đây suy ra

$$\omega = \frac{2J\hbar}{MD^2} .$$

6045

(a) Tìm năng lượng tính từ đáy hố thế của trạng thái cơ bản và hai trạng thái kích thích đầu tiên của một hạt có khối lượng m ở trạng thái liên kết trong hố thế chữ nhật sâu một chiều bề rộng ℓ như trong Hình 6.12. Vẽ các hàm sóng tương ứng.



Hình 6.12

(b) Tính các yếu tố ma trận của quá trình chuyển dời lưỡng cực điện từ hai trạng thái kích thích đầu tiên xuống trạng thái cơ bản. Giải thích sự khác nhau nếu có của hai kết quả. [Không cần thiết phải tính tất cả các tích phân].

(c) Đưa ra quy tắc chọn lọc đối với sự chuyển dời lưỡng cực điện giữa hai trạng thái bất kì của hệ.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Các mức năng lượng của hệ là

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ml^2} , \qquad \text{trong đó } n = 1, 2, \ldots .$$

Các hàm sóng lẻ được cho bởi

$$\psi_n^+(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \cos \frac{n\pi x}{l}, \qquad \text{trong đó } n = \text{số nguyên lẻ}.$$

Các hàm sóng chẵn là

$$\psi_n^-(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi x}{l}, \qquad \text{trong đó } n = \text{số nguyên chẵn}.$$

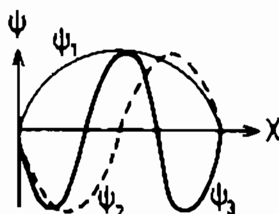
Năng lượng và hàm sóng của trạng thái cơ bản và hai trạng thái kích thích đầu tiên tương ứng là

$$n = 1, \qquad E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2}, \qquad \psi_1^+(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{2}{l}} \cos\left(\frac{\pi x}{l}\right),$$

$$n = 2, \qquad E_2 = 4E_1, \qquad \psi_2^-(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{2\pi x}{l}\right),$$

$$n = 3, \qquad E_3 = 9E_1, \qquad \psi_3^+(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{2}{l}} \cos\left(\frac{3\pi x}{l}\right).$$

Các hàm sóng trên được vẽ trên Hình 6.13.



Hình 6.13

(b) Hệ số Einstein của quá trình chuyển dời lưỡng cực điện là

$$A_{kk'} = \frac{4e^2\omega_{kk'}^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{r}_{kk'}|^2.$$

Yếu tố ma trận của quá trình chuyển dời lưỡng cực điện từ trạng thái kích thích đầu tiên xuống trạng thái cơ bản là

$$\langle x \rangle_{21} = \int_{-l/2}^{l/2} \psi_1^*(\mathbf{x})\, x \psi_2(\mathbf{x})\, dx$$

$$= \frac{2}{l} \int_{-l/2}^{l/2} x \cos \frac{\pi x}{l} \sin \frac{2\pi x}{l}\, dx.$$

Yếu tố ma trận của quá trình chuyển dời lưỡng cực điện từ trạng thái kích thích thứ hai xuống trạng thái cơ bản là

$$\langle x \rangle_{31} = \int_{-l/2}^{l/2} \psi_1^*(\mathbf{x})\, x\psi_3(\mathbf{x})\, dx$$

$$= \frac{2}{l} \int_{-l/2}^{l/2} x \cos\frac{\pi x}{l} \cos\frac{3\pi x}{l}\, dx\,.$$

Yếu tố ma trận thứ hai $\langle x \rangle_{31}$ bằng 0 vì hàm dưới dấu tích phân là hàm lẻ. Vì vậy, không thể có chuyển dời lưỡng cực điện từ trạng thái kích thích thứ hai xuống trạng thái cơ bản. Với sự chuyển dời lưỡng cực điện từ trạng thái kích thích thứ nhất xuống trạng thái cơ bản thì không có sự hạn chế nào.

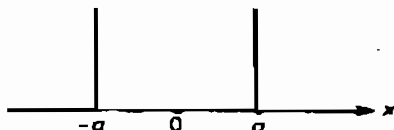
(c) Yếu tố ma trận của quá trình chuyển dời lưỡng cực điện từ trạng thái k sang trạng thái k' của hệ là

$$\langle x \rangle_{kk'} = \int_{-l/2}^{l/2} \psi_{k'}^*(\mathbf{x})\, \psi_k(\mathbf{x}) \cdot x dx\,.$$

Nếu các trạng thái ban đầu và trạng thái cuối có cùng tính chẵn lẻ, hàm lấy tích phân là một hàm lẻ và $\langle x \rangle_{kk'}$ bằng 0. Vì vậy, quy tắc chọn lọc tổng quát cho quá trình chuyển dời lưỡng cực điện là bất kì quá trình chuyển dời nào giữa các trạng thái có cùng tính chẵn lẻ đều bị cấm.

6046

Xét một hạt ở trong hố thế một chiều sâu vô hạn. Chọn gốc tọa độ ở tâm hố thế như trên Hình 6.14.



Hình 6.14

(a) Tìm các mức năng lượng khả dĩ?

(b) Tìm các hàm sóng khả dĩ?

(c) Với lớp lời giải nào thì thế nhiễu loạn $\Delta V(x) = kx$ không cho bổ chính bậc một đối với năng lượng?

(d) Nếu các quá trình chuyển dời giữa các trạng thái có thể xảy ra do bức xạ lưỡng cực, hãy nêu quy tắc chọn lọc của chúng?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Các mức năng lượng khả dĩ là

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{8ma^2} . \qquad (n = 1, 2 \ldots)$$

(b) Có hai lớp hàm sóng khả dĩ, một là các hàm chẵn,

$$\psi_n^+(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \cos \frac{n\pi x}{2a} ,$$

trong đó n là số nguyên lẻ, và hai là các hàm lẻ,

$$\psi_n^-(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin \frac{n\pi x}{2a} ,$$

trong đó n là một số nguyên chẵn.

(c) Năng lượng khi tính đến bổ chính bậc một của nhiễu loạn

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle \Delta V \rangle_{nn} = E_n^{(0)} + \langle kx \rangle_{nn} .$$

Vì $\Delta V = kx$ là hàm lẻ, các yếu tố ma trận chéo đều bằng 0. Điều đó có nghĩa là, chỉ cần hàm sóng có tính chẵn lẻ xác định (dù là chẵn hay lẻ), thì bổ chính bậc một đối với năng lượng đều bằng 0. Chỉ các trạng thái không có tính chẵn lẻ xác định thì mới có bổ chính bậc nhất của nhiễu loạn vào năng lượng.

(d) Các quá trình chuyển dời lưỡng cực điện được xác định bởi $\langle x \rangle_{kk'}$. Vì

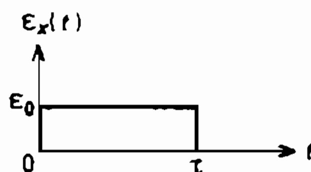
$$\langle x \rangle_{kk'} = \langle k'|x|k \rangle \propto \langle k'|a^+ + a|k \rangle$$
$$\approx \sqrt{k+1}\, \delta_{k',k+1} + \sqrt{k}\, \delta_{k',k-1} ,$$

nên quy tắc chọn lọc là $\Delta k = \pm 1$.

6047

Một hạt có điện tích q chuyển động một chiều ban đầu ở trạng thái liên kết do thế delta ở gốc toạ độ. Từ thời điểm $t = 0$ tới $t = \tau$ hạt chịu tác dụng của

một điện trường không đổi ε_0 dọc theo trục x như trên Hình 6.15. Mục đích của bài tập này là tính xác suất tìm thấy hạt tại thời điểm $t > \tau$ ở trong trạng thái liên kết với năng lượng nằm trong khoảng E_k và $E_k + dE_k$.



Hình 6.15

(a) Tìm hàm riêng đã chuẩn hoá ứng với trạng thái liên kết tương ứng với thế delta $V(x) = -A\delta(x)$.

(b) Giả sử các trạng thái không liên kết có thể coi gần đúng như là các trạng thái của hạt tự do với điều kiện biên tuần hoàn trong một hộp chiều dài L. Tính hàm sóng đã chuẩn hoá với vectơ sóng k, $\psi_k(x)$, mật độ trạng thái như là một hàm của k, $D(k)$, và mật độ trạng thái như là một hàm của năng lượng hạt tự do, $D(E_k)$.

(c) Giả sử điện trường có thể xem như một nhiễu loạn. Hãy viết số hạng nhiễu loạn $\hat{H}_1$, trong Hamiltonian, và tính yếu tố ma trận của $\hat{H}_1$ giữa trạng thái đầu và trạng thái cuối, $\langle 0 | \hat{H}_1 | k \rangle$.

(d) Xác suất của quá trình chuyển dời giữa trạng thái đầu được chiếm $|I\rangle$ và trạng thái cuối $|F\rangle$ do Hamiltonian nhiễu loạn yếu $\hat{H}_1(t)$ được cho bởi

$$P_{I\to F}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left| \int_{-\infty}^{t} \langle F | \hat{H}_1(t') | I \rangle \, e^{i\omega_{FI}t'} \, dt' \right|^2,$$

trong đó $\omega_{FI} = (E_F - E_I)/\hbar$. Tìm biểu thức của xác suất $P(E_k)dE_k$ để hạt nằm ở trạng thái không liên kết với năng lượng nằm trong khoảng E_k và $E_k + dE_k$ khi $t > \tau$.

(MIT)

Lời giải:

(a) Hàm sóng thoả mãn phương trình Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - A\delta(\mathbf{x})\,\psi = E\psi\,,$$

trong đó $E < 0$, hay là

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - k^2\psi + A_0\delta(\mathbf{x})\,\psi = 0\,.$$

với

$$k = \sqrt{\frac{2m\,|\,E\,|}{\hbar^2}}, \qquad A_0 = \frac{2mA}{\hbar^2}.$$

Lấy tích phân phương trình trên từ $-\varepsilon$ đến $+\varepsilon$, với ε là số dương nhỏ tuỳ ý và sau đó cho $\varepsilon \to 0$, ta thu được

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -A_0\psi(0).$$

Từ tính liên tục của hàm sóng tại $x = 0$, ta cũng có

$$\psi(+0) = \psi(-0) = \psi(0).$$

Vì thế

$$\frac{\psi'(+0)}{\psi(+0)} - \frac{\psi'(-0)}{\psi(-0)} = -A_0.$$

Giải phương trình Schrödinger với $x \neq 0$ ta thu được $\psi(x) = Ce^{-k|x|}$. Tiếp đó vì $\psi(x) = Ce^{-kx}$ với $x > 0$ và $\psi(x) = Ce^{kx}$ với $x < 0$ nên ta có

$$\frac{\psi'(+0)}{\psi(+0)} - \frac{\psi'(-0)}{\psi(-0)} = -2k.$$

Vậy

$$k = \frac{A_0}{2} = \frac{mA}{\hbar^2}.$$

Mức năng lượng của trạng thái liên kết là

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{mA^2}{2\hbar^2},$$

và hàm riêng đã chuẩn hoá tương ứng là

$$\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{mA}{\hbar^2}}\exp\left(-\frac{mA}{\hbar^2}|x|\right).$$

(b) Nếu các trạng thái không liên kết có thể được biểu diễn gần đúng bởi sóng phẳng e^{ikx} trong hộp một chiều có chiều dài L với điều kiện biên tuần hoàn, ta có

$$\exp\left[ik\left(-\frac{L}{2}\right)\right] = \exp\left(ik\frac{L}{2}\right),$$

suy ra $e^{ikL} = 1$, hay là

$$kL = 2n\pi. \qquad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

Do đó

$$k = \frac{2n\pi}{L} = k_n ,$$

Vì thế hàm sóng phẳng đã chuẩn hoá với vectơ sóng k là

$$\psi_k(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left[i\left(\frac{2n\pi}{L} x\right)\right].$$

Chú ý rằng trạng thái với năng lượng E_k suy biến bậc hai khi $k \neq 0$, vì vậy số trạng thái có xung lượng nằm trong khoảng p và $p + dp$ là

$$\frac{Ldp}{2\pi\hbar} = D(k)\,dk = \frac{1}{2}\,D(E_k)\,dE_k .$$

Vì k, p và E_k liên hệ với nhau bởi hệ thức

$$k = \frac{p}{\hbar},\ E_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

nên ta có

$$D(k) = \frac{L}{2\pi}, \qquad D(E_k) = \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E_k}}.$$

(c) Xem ε_0 như một nhiễu loạn, Hamilotnian nhiễu loạn là $\hat{H}_1 = -q\varepsilon_0 x$.

Yếu tố ma trận của nhiễu loạn giữa trạng thái đầu và trạng thái cuối là

$$\begin{aligned}
\langle k \,|\, \hat{H}_1 \,|\, 0\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^*(-q\varepsilon_0 x)\,\psi\, dx \\
&= -\frac{q\varepsilon_0}{\sqrt{L}}\sqrt{\frac{mA}{\hbar^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp(-ikx - k_0\,|x|)\, dx \\
&= -\frac{q\varepsilon_0}{\sqrt{L}}\sqrt{\frac{mA}{\hbar^2}}\, i\frac{d}{dk} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ikx - k_0\,|x|)\, dx \\
&= -\frac{q\varepsilon_0}{\sqrt{L}}\sqrt{\frac{mA}{\hbar^2}}\, i\frac{d}{dk} \left[\int_{-\infty}^{0} \exp(-ikx + k_0 x)\, dx \right. \\
&\quad \left. + \int_0^{\infty} \exp(-ikx - k_0 x)\, dx\right] \\
&= -\frac{q\varepsilon_0}{\sqrt{L}}\sqrt{\frac{mA}{\hbar^2}}\,(-4ikk_0)\,\frac{1}{[k^2+k_0^2]^2} \\
&= \frac{4iq\varepsilon_0}{\sqrt{L}}\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{k}{\left[k^2 + \left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^2\right]^2}\,.
\end{aligned}$$

(d) Hamiltonian nhiễu loạn là

$$\hat{H}_1 = \begin{cases} 0, & (-\infty < t < 0) \\ -q\varepsilon_0 x, & (0 \le t \le \tau) \\ 0. & (\tau < t < +\infty) \end{cases}$$

Xác suất chuyển dời tại thời điểm $t > \tau$ là

$$\begin{aligned}
P_{I\to F}(t) &= \frac{1}{\hbar^2}\,|\langle k|\hat{H}_1|0\rangle|^2 \left| \int_0^{\tau} dt' \exp(i\omega_{FI}\, t') \right|^2 \\
&= \frac{1}{\hbar^2}\,|\langle k|\hat{H}_1|0\rangle|^2\, \frac{\sin^2(\omega_{FI}\tau/2)}{(\omega_{FI}/2)^2}\,.
\end{aligned}$$

Vì

$$E_F = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\,, \quad E_I = -\frac{mA^2}{2\hbar^2}\,, \quad \omega_{FI} = \frac{1}{\hbar}(E_F - E_I)\,,$$

nên ta có

$$\frac{\sin^2(\omega_{FI}\tau/2)}{(\omega_{FI}/2)^2} = \frac{\sin^2\left\{\frac{\hbar\tau}{4m}\left[k^2+\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^2\right]\right\}}{\left\{\frac{\hbar}{4m}\left[k^2+\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^2\right]\right\}^2}.$$

Vậy, xác suất cần tìm là

$$\begin{aligned}
P(E_k)\,dE_k &= P_{I\to F}(t)\,D(E_k)\,dE_k \\
&= \frac{(16q\varepsilon_0)^2 m^3 k_0^3}{\pi\hbar^7\left(k_0^2+\frac{2mE_k}{\hbar^2}\right)^6}\sqrt{2mE_k} \\
&\quad\times\sin^2\left[\frac{\hbar\tau}{4m}\left(k_0^2+\frac{2mE_k}{\hbar^2}\right)\right]dE_k \\
&= \frac{(16q\varepsilon_0)^2 m^3\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^3}{\pi\hbar^7\left[\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^2+\frac{2mE_k}{\hbar^2}\right]^6}\sqrt{2mE_k} \\
&\quad\times\sin^2\left\{\frac{\hbar\tau}{4m}\left[\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^2+\frac{2mE_k}{\hbar^2}\right]\right\}dE_k\,.
\end{aligned}$$

6048

Xét một nguyên tử có hai mức năng lượng với trạng thái $|1\rangle$ và $|2\rangle$ và hiệu hai mức năng lượng là $E_2 - E_1 = \hbar\omega_{21}$. Ban đầu nguyên tử ở trong trạng thái cơ bản $|1\rangle$ và chịu tác dụng của bức xạ điện từ được mô tả bởi $\mathbf{E} = \mathbf{E}_m\,(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$.

(a) Nếu $\omega = \omega_{12}$, hãy tính xác suất để nguyên tử ở trạng thái $|2\rangle$ vào thời điểm t sau đó.

(b) Nếu ω chỉ xấp xỉ bằng ω_{12}, điều này sẽ gây nên sự khác biệt gì về mặt định tính? Hãy tính xác suất nói trên cho trường hợp này giống như đã làm trong phần (a).

(Buffalo)

Lời giải:

Kí hiệu

$$H_0 |1\rangle = E_1 |1\rangle = \hbar\omega_1 |1\rangle ,$$
$$H_0 |2\rangle = E_2 |2\rangle = \hbar\omega_2 |2\rangle .$$

Hamiltonian có thể viết dưới dạng

$$H = H_0 + H' ,$$

trong đó

$$H' = -e\mathbf{x} \cdot \mathbf{E}_m(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

là nhiễu loạn xuất hiện do sự có mặt của bức xạ điện từ. Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian là

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |t\rangle = H |t\rangle$$

với điều kiện ban đầu $|t = 0\rangle = |1\rangle$. Giả sử nghiệm có dạng

$$|t\rangle = c_1(t)\, e^{-i\omega_1 t} |1\rangle + c_2(t)\, e^{-i\omega_2 t} |2\rangle$$

với $c_1(0) = 1,\ c_2(0) = 0$. Thay vào phương trình Schrödinger ta được

$$\begin{aligned} i\hbar(\dot{c}_1 e^{-i\omega_1 t} |1\rangle - ic_1\omega_1 e^{-i\omega_1 t} |1\rangle \\ + \dot{c}_2 e^{-i\omega_2 t} |2\rangle - ic_2\omega_2 e^{-i\omega_2 t} |2\rangle) \\ = c_1 e^{-i\omega_1 t}\hbar\omega_1 |1\rangle + c_2 e^{-i\omega_2 t}\hbar\omega_2 |2\rangle \\ + c_1 e^{-i\omega_1 t} H' |1\rangle + c_2 e^{-i\omega_2 t} H' |2\rangle . \end{aligned}$$

Vì

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{-i\omega_1 t} |1\rangle) = \hbar\omega_1 e^{-i\omega_1 t} |1\rangle , \qquad \text{v.v.}$$

nên phương trình trên có thể đưa về dạng đơn giản hơn

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{c}_1 e^{-i\omega t} |1\rangle + i\hbar\dot{c}_2 e^{-i\omega_2 t} |2\rangle \\ = c_1 e^{-i\omega_1 t} H' |1\rangle + c_2 e^{-i\omega_2 t} H' |2\rangle . \end{aligned}$$

Nhân hai vế phương trình trên với $\langle 1|$ và với $\langle 2|$, ta thu được

$$i\hbar\dot{c}_1 = c_1 \langle 1|H'|1\rangle + c_2\, e^{-i(\omega_2-\omega_1)t} \langle 1|H'|2\rangle\,,$$

$$i\hbar\dot{c}_2 = c_1\, e^{i(\omega_2-\omega_1)t} \langle 2|H'|1\rangle + c_2 \langle 2|H'|2\rangle\,.$$

Viết

$$\langle i| - e\mathbf{x}\cdot\mathbf{E}_m |j\rangle = \hbar a_{ij}\,,$$

hay

$$\langle i|H'|j\rangle = (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})\,\hbar a_{ij}\,,$$

các phương trình trên trở thành

$$i\hbar\dot{c}_1 = c_1 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})\,\hbar a_{11} + c_2\, e^{-i\omega_{21}t} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})\,\hbar a_{12}\,,$$

$$i\hbar\dot{c}_2 = c_1\, e^{i\omega_{21}t} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})\,\hbar a_{21} + c_2 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})\,\hbar a_{22}\,,$$

trong đó $\omega_{21} = \omega_2 - \omega_1$. Nếu E_m nhỏ, có thể bỏ qua các số hạng dao động nhanh và các phương trình trên được viết lại dưới dạng

$$\dot{c}_1 = -ia_{12}c_2\, e^{i(\omega-\omega_{21})t}\,,$$

$$\dot{c}_2 = -ia_{21}c_1\, e^{i(\omega_{21}-\omega)t}\,.$$

Khử c_1 từ hệ trên ta tìm được

$$\ddot{c}_2 - i(\omega_{21} - \omega)\,\dot{c}_2 + a_{12}a_{21}c_2 = 0\,.$$

Vì $|t=0\rangle = |1\rangle$, ta có các điều kiện ban đầu

$$c_1(0) = 1\,, \qquad c_2(0) = 0\,,$$

$$\dot{c}_2(0) = -ia_{21}c_1(0) = -ia_{21}\,.$$

(a) Với $\omega = \omega_{21}$ phương trình trên trở thành

$$\ddot{c}_2 + \Omega^2 c_2 = 0\,,$$

trong đó $\Omega^2 = a_{12}a_{21} = |a_{12}|^2$.

Nghiệm của phương trình này là

$$c_2 = A\,e^{i\Omega t} + Be^{-i\Omega t}\,.$$

Với điều kiện biên đối với c_2, ta có

$$A = -B = -\frac{a_{21}}{2\Omega}\,.$$

Vậy

$$c_2(t) = -i\,\frac{a_{21}}{\Omega}\sin\Omega t\,,$$

và xác suất để nguyên tử ở trạng thái $|2\rangle$ vào thời điểm t là

$$|c_2(t)|^2 = \sin^2\Omega t\,.$$

(b) Với $\omega \approx \omega_{21}$, ta thử xét nghiệm có dạng $c_2 \sim e^{i\lambda t}$. Thay vào phương trình, ta có

$$c_2 = Ae^{i\lambda_+ t} + Be^{i\lambda_- t}$$

trong đó

$$\lambda_\pm = \frac{1}{2}\left[(\omega_{21}-\omega) \pm \Lambda\right]$$

với $\Lambda = [(\omega_{21}-\omega)^2 + 4\Omega^2]^{1/2}$. Từ điều kiện biên cho c_2, dẫn đến

$$c_2(t) = -\frac{2ia_{21}}{\Lambda}\exp\left[\frac{i}{2}(\omega_{21}-\omega)\,t\right]\sin\left(\frac{\Lambda}{2}\,t\right).$$

Vậy, xác suất cần tìm là

$$|c_2(t)|^2 = \frac{4\,|a_{21}|^2}{\Lambda^2}\sin^2\left(\frac{\Lambda}{2}\,t\right).$$

6049

Trong HCl người ta quan sát thấy một số vạch quang phổ hấp thụ với các số sóng (trong đơn vị cm^{-1}) là 83,03; 103,73; 124,30; 145,03; 165,51 và 185,86. Đó là các quá trình chuyển dời do dao động hay chuyển động quay? Nếu là chuyển dời do dao động thì tần số đặc trưng bằng bao nhiêu? Nếu là chuyển dời do chuyển động quay thì tương ứng với các giá trị nào của J, và mômen quán tính của HCl bằng bao nhiêu?

Trong trường hợp đó, hãy đánh giá khoảng cách giữa các hạt nhân.

(Chicago)

Lời giải:

Các mức năng lượng của phân tử hai nguyên tử trong gần đúng bậc nhất được cho bởi

$$W_{nJ} = -U_0 + \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{J(J+1)\,\hbar^2}{2MR^2}\,,$$

trong đó n là một số nguyên, M và R là khối lượng rút gọn và khoảng cách giữa hai nguyên tử. Trong vế phải, các số hạng lần lượt là năng lượng liên quan tới cấu trúc electron, dao động của hạt nhân và chuyển động quay của phân tử. Vì

$$W_{n+1,J} - W_{n,J} = \hbar\omega\,,$$

nên các vạch quang phổ do dao động chỉ có một tần số, và do đó các vạch quang phổ quan sát được không phải ứng với chuyển dời do dao động. Các mức năng lượng do chuyển động quay là

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I}\,J(J+1)\,,$$

trong đó $I = MR^2$, và quy tắc chọn lọc $|\Delta J| = 1$ cho ta số sóng của vạch quang phổ xuất hiện do quá trình chuyển dời từ $J+1 \rightarrow J$ như sau

$$\tilde{\nu} \equiv \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{hc}\,\Delta E_J = \frac{\hbar^2(J+1)}{hcI}\,.$$

Vậy

$$I = \frac{\hbar^2}{hc\,\Delta\tilde{\nu}}\,.$$

Với chuyển dời $J \rightarrow J-1$, năng lượng của vạch phổ là

$$hc\tilde{\nu} = \frac{\hbar^2 J}{I}\,,$$

Năng lượng này tỉ lệ với J. Khoảng cách giữa hai vạch phổ liền nhau $\Delta\tilde{\nu} = \frac{\hbar^2}{I}\Delta J = \frac{\hbar^2}{I}$ là một hằng số. Với những vạch phổ đã cho ta có

$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}\,(\text{cm}^{-1})$	Chuyển dời $J \rightarrow J-1$	$\Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right)\ (\text{cm}^{-1})$
83,03	$4 \rightarrow 3$	20,70
103,73	$5 \rightarrow 4$	20,57
124,30	$6 \rightarrow 5$	20,73
145,03	$7 \rightarrow 6$	20,48
165,51	$8 \rightarrow 7$	20,35
185,86	$9 \rightarrow 8$	
$\overline{(\Delta\frac{1}{\lambda})} = 20,57\,(\text{cm}^{-1})\,.$		

Vậy, mômen quán tính của phân tử HCl là

$$I = \frac{\hbar^2}{hc\,\Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right)}$$

$$= \frac{6,63 \times 10^{-34}}{(2\pi)^2 \times 3,0 \times 10^8 \times 20,57 \times 10^2}$$

$$= 2,72 \times 10^{-47}\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^2\,.$$

Vì $M^{-1} = m_{\mathrm{H}}^{-1} + m_{\mathrm{Cl}}^{-1}$, khoảng cách giữa hai hạt nhân là

$$R = \left[\left(\frac{m_{\mathrm{H}} + m_{\mathrm{Cl}}}{m_{\mathrm{H}}\, m_{\mathrm{Cl}}}\right) I\right]^{1/2}$$

$$= \left[\frac{(1+35)}{1 \times 35 \times 1,67 \times 10^{-27}} \times 2,72 \times 10^{-47}\right]^{1/2}$$

$$= 1,29 \times 10^{-10}\,\mathrm{m} = 1,29\,\text{Å}\,.$$

6050

Một hệ tuân theo cơ học lượng tử ban đầu ở trạng thái cơ bản $|0\rangle$. Tại thời điểm $t = 0$, ta đưa vào một nhiễu loạn có dạng $H'(t) = H_0 e^{-t/T}$. Hãy chứng tỏ rằng vào những thời điểm t lớn, xác suất để hệ ở trạng thái $|1\rangle$ được cho bởi

$$\frac{|\langle 0|H_0|1\rangle|^2}{\left(\frac{\hbar}{T}\right)^2 + (\Delta\varepsilon)^2}\,,$$

trong đó $\Delta\varepsilon$ là hiệu năng lượng của hai trạng thái $|0\rangle$ và $|1\rangle$. Hãy nói rõ những giả thiết, nếu có, đã sử dụng để tìm ra kết quả này.

(*Columbia*)

Lời giải:

Trong gần đúng bậc nhất của lý thuyết nhiễu loạn, biên độ xác suất chuyển dời được cho bởi

$$c_{k'k}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{k'k}\, e^{i\omega_{k'k}t'}\, dt'\,,$$

trong đó $H'_{k'k} = \langle k'|H'|k\rangle$. Từ đây có

$$\begin{aligned} c_{10}(t) &= \frac{1}{i\hbar}\int_0^\infty e^{i\omega_{10}t}\, e^{-t/T}\,\langle 1|H_0|0\rangle\, dt \\ &= \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{\left(\frac{1}{T} - i\omega_{10}\right)} < 1|H_0|0\rangle \\ &= \frac{1}{i(\hbar/T) + \Delta\varepsilon}\,\langle 1|H_0|0\rangle\,, \end{aligned}$$

trong đó $\Delta\varepsilon = \omega_{10}\hbar$ là hiệu hai mức năng lượng của hai trạng thái $|0\rangle$ và $|1\rangle$. Vậy, xác suất để hệ nằm ở trạng thái $|1\rangle$ ở những thời điểm t lớn là

$$P_{10} = |c_{10}(t)|^2 = \frac{|\langle 0|H_0|1\rangle|^2}{\hbar^2/T^2 + (\Delta\varepsilon)^2}\,.$$

Ở trên, ta đã giả thiết rằng H_0 rất nhỏ sao cho chỉ cần tính đến gần đúng bậc nhất của lý thuyết nhiễu loạn.

6051

Một hạt có điện tích e bị giam trong hộp lập phương ba chiều kích thước $2b$. Một điện trường $\mathbf{E}$ được cho bởi

$$\mathbf{E} = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ \mathbf{E}_0\, e^{-\alpha t}, & t > 0, \end{cases} \qquad (\alpha = \text{một hằng số dương})$$

được đưa vào trong hộp. Vectơ $\mathbf{E}_0$ vuông góc với một trong các mặt của hộp. Tính gần đúng đến bậc thấp nhất của E_0 xác suất để hạt mang điện, ở trạng thái cơ bản tại $t = 0$, chuyển lên trạng thái kích thích thứ nhất khi $t = \infty$. (Nếu muốn, có thể đưa ra kết quả dưới dạng tích phân xác định không thứ nguyên được định nghĩa hợp lý).

(Berkeley)

Lời giải:

Thay hộp lập phương bằng thế

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < 2b,\ 0 < y < 2b,\ 0 < z < 2b, \\ \infty, & \text{các trường hợp khác}. \end{cases}$$

Hàm sóng gần đúng bậc không của hạt trong hộp là

$$\psi_{lmn}(x, y, z) = \sqrt{\frac{1}{b^3}} \sin\frac{l\pi x}{2b} \sin\frac{m\pi y}{2b} \sin\frac{n\pi z}{2b} \equiv |l\, m\, n\rangle \,.$$

Vậy, trạng thái cơ bản là $|1\,1\,1\rangle$, các trạng thái kích thích thứ nhất là $|2\,1\,1\rangle$, $|1\,2\,1\rangle$, $|1\,1\,2\rangle$. Chọn **E** hướng theo trục x, nghĩa là, $\mathbf{E}_0 = E_0\mathbf{e}_x$. Khi đó $H' = -eE_0 x e^{-\alpha t}$. Ta tính yếu tố ma trận của các quá trình chuyển dời giữa trạng thái cơ bản và các trạng thái kích thích thứ nhất

$$\langle 1\;1\;1|x|2\;1\;1\rangle = \frac{1}{b}\int_0^{2b} x \sin\frac{\pi x}{2b} \sin\frac{\pi x}{b}\, dx = -\frac{32b}{9\pi^2} \,.$$

$$\langle 1\;1\;1|x|1\;2\;1\rangle = \langle 1\;1\;1|x|1\;1\;2\rangle = 0 \,.$$

Vậy, xác suất chuyển dời là

$$P = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\infty \langle 211|H'|111\rangle \, \exp\left(\frac{i\Delta E t}{\hbar}\right) dt\right|^2 ,$$

trong đó

$$\Delta E = \frac{\pi^2\hbar^2}{8mb^2}(2^2 + 1^2 + 1^2 - 1^2 - 1^2 - 1^2) = \frac{3\pi^2\hbar^2}{8mb^2} \,.$$

Do đó, ta có kết quả sau

$$P = \left(\frac{32beE_0}{9\hbar\pi^2}\right)^2 \left|\int_0^\infty \exp\left(-\alpha t + i\,\frac{\Delta E t}{\hbar}\right) dt\right|^2$$

$$= \left(\frac{32beE_0}{9\hbar\pi^2}\right)^2 \frac{\hbar^2}{\alpha^2\hbar^2 + (\Delta E)^2} \,.$$

6052

Một hạt nhân ^{27}Al ở trạng thái liên kết trong trường thế của dao động tử điều hoà một chiều với tần số ω. Kí hiệu các trạng thái là $\psi_{m\alpha} = \psi_m(x)\,\phi_\alpha$, trong đó $\psi_m(x)$, $m = 0, 1, 2, \ldots$, là hàm riêng của thế dao động tử điều hoà, mô tả chuyển động của khối tâm và $\phi_\alpha(x)$, $\alpha = 0, 1, 2, \ldots$, là hàm sóng mô tả trạng thái nội tại của hạt nhân. Giả sử ban đầu hạt nhân ở trạng thái $\psi_0(x)\,\phi_1$

và sau đó chuyển về trạng thái cơ bản ϕ_0 đồng thời phát ra một photon theo hướng $-x$. Giả thiết rằng năng lượng kích thích hạt nhân lớn hơn rất nhiều so với năng lượng kích thích của dao động tử điều hoà $E^* = (E_{\alpha=1} - E_{\alpha=0}) \gg \hbar\omega$.

(a) Hàm sóng của hạt nhân sau khi bức xạ photon có dạng như thế nào?

(b) Viết biểu thức của xác suất tương đối P_1/P_0, trong đó P_n là xác suất để hạt nhân ở trạng thái $\psi_{n0} = \psi_n(x)\,\phi_0$.

(c) Tính P_1/P_0 với $E^* = 840$ keV và $\hbar\omega = 1$ keV.

(*MIT*)

Lời giải:

(a) Phép biến đổi Galileo

$$x' = x - vt\,, \qquad t' = t$$

biến đổi hàm sóng $\psi(x,\, t)$ theo công thức

$$\psi(x,\, t) = \exp\left(i\,\frac{Mv^2}{2\hbar}\,t' + i\,\frac{Mv}{\hbar}\,x'\right)\,\psi(x',\, t')\,,$$

trong đó v là vận tốc của hệ quy chiếu L' so với hệ quy chiếu L và được chọn hướng theo trục x, và M là khối lượng của hạt.

Sau khi phát ra một photon với năng lượng E^* theo chiều $-x$ hạt nhân có vận tốc $v = \frac{E^*}{Mc}$ theo hướng của trục x. Đồng thời nó chuyển về trạng thái cơ bản ϕ_0. Vậy là ban đầu ($t' = t = 0$) hạt nhân có vận tốc v và ở trạng thái cơ bản trong hệ quy chiếu L', gắn liền với hạt nhân ϕ_0. Như vậy, sau khi phát ra photon hạt nhân ở trạng thái ψ được cho bởi ($t = 0$, $x = x'$)

$$\psi(x,\, 0) = \exp\left(i\,\frac{Mv}{\hbar}\,x\right)\,\psi_0(x)\,\phi_0$$

trong hệ quy chiếu L của người quan sát.

(b) Xác suất để hạt nhân ở trạng thái $\psi_{no} = \psi_n(x)\,\phi_o$ là

$$\begin{aligned}
P_n &= |\langle\psi_{n0}|\psi(x,\, 0)\rangle|^2 \\
&= \left|\langle\psi_n(x)\,\phi_0\,|\,\exp\left(i\,\frac{Mv}{\hbar}\,x\right)\,|\,\phi_0\psi_0(x)\rangle\right|^2 \\
&= \left|\langle n\,|\,\exp\left(i\,\frac{Mv}{\hbar}\,x\right)\,|\,0\rangle\right|^2,
\end{aligned}$$

trong đó $|n\rangle = |\psi_n(x)\rangle$. Sử dụng các toán tử sinh và huỷ a^+, a, ta có thể viết

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}(a^+ + a),$$

và vì $e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2}$ ($[A, B]$ giao hoán với A, B) nên ta có

$$\begin{aligned}
P_n &= \left|\langle n|\exp\left(i\frac{Mv}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}(a^+ + a)\right)|0\rangle\right|^2 \\
&= \left|\langle n|\exp\left(i\frac{Mv}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}a^+\right)\exp\left(i\frac{Mv}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}a\right)\right. \\
&\quad \left.\times \exp\left(-\frac{Mv^2}{4\hbar\omega}\right)|0\rangle\right|^2 \\
&= \exp\left(-\frac{Mv^2}{2\hbar\omega}\right)\left|\sum_{m,l=0}^{\infty}\frac{\left(i\sqrt{\frac{Mv^2}{2\hbar\omega}}\right)^m}{m!}\frac{\left(i\sqrt{\frac{Mv^2}{2\hbar\omega}}\right)^l}{l!}\langle n|(a^+)^m a^l|0\rangle\right|^2 \\
&= \exp\left(-\frac{Mv^2}{2\hbar\omega}\right)\left|\frac{\left(i\sqrt{\frac{Mv^2}{2\hbar\omega}}\right)^n}{n!}\sqrt{n!}\right|^2 \\
&= \frac{1}{n!}\left(\frac{\frac{1}{2}Mv^2}{\hbar\omega}\right)^n\exp\left(-\frac{\frac{1}{2}Mv^2}{\hbar\omega}\right).
\end{aligned}$$

Vậy

$$\begin{aligned}
\frac{P_1}{P_0} &= \frac{Mv^2}{2\hbar\omega} \approx \frac{E^{*2}}{2Mc^2\hbar\omega} = \frac{0,84^2}{2\times 27\times 931,5\times 10^{-3}} \\
&\approx 1,4\times 10^{-2}.
\end{aligned}$$

6053

Xét một tình huống xảy ra khi một hạt muon âm bị bắt bởi một nguyên tử nhôm (nguyên tử số $Z = 13$). Sau khi muon đi vào bên trong đám mây

electron nó tạo với hạt nhân nhôm thành một nguyên tử muon tựa hydro. Khối lượng của muon là 105,7 MeV.

(a) Tính bước sóng (theo đơn vị Å) của photon được sinh ra khi nguyên tử muon nói trên chuyển dời từ trạng thái $3d$ (bỏ qua chuyển động của hạt nhân).

(b) Tính thời gian sống trung bình của nguyên tử muon trong trạng thái $3d$, biết rằng thời gian sống của nguyên tử hydro trong trạng thái $3d$ là $1,6 \times 10^{-8}$ giây.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Với các quá trình chuyển dời tự phát từ trạng thái $3d$, xác suất lớn nhất là quá trình $3d \to 2p$. Trong gần đúng phi tương đối tính, năng lượng của photon được cho bởi

$$\begin{aligned} h\nu &= \frac{m_\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2}\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{3^2}\right) \\ &= \frac{m_\mu c^2 Z^2}{2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\left(\frac{5}{36}\right) \\ &= \frac{105,7\times 13^2}{2}\left(\frac{1}{137}\right)^2\left(\frac{5}{36}\right) = 6,61\times 10^{-2}\,\text{MeV}. \end{aligned}$$

Bước sóng tương ứng là

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{h\nu} = \frac{4,135\times 10^{-15}\times 3\times 10^{10}}{6,61\times 10^4} = 1,88\times 10^{-9}\,\text{cm}.$$

(b) Xác suất chuyển dời trong một đơn vị thời gian là

$$A \propto \omega^3 \left|\mathbf{r}_{kk'}\right|^2.$$

Với các nguyên tử tựa hydro thì

$$\left|\mathbf{r}_{kk'}\right| \propto \frac{1}{Z}, \qquad \omega \propto mZ^2, \qquad \text{và như vậy} \qquad A \propto m^3 Z^4,$$

do đó thời gian sống trung bình của nguyên tử muon ở trạng thái $3d$ là

$$T_\mu = \left(\frac{A_0}{A}\right) T_0 = \left(\frac{m_0}{m_\mu}\right)^3 \frac{T_0}{Z^4}$$
$$= \left(\frac{0,51}{105,7}\right)^3 \times \frac{1}{13^4} \times 1,6 \times 10^{-8} = 6,3 \times 10^{-20}\, s\,.$$

6054

Một hạt có khối lượng M, điện tích e, và spin bằng 0 chuyển động trong thế hút $k(x^2 + y^2 + z^2)$. Bỏ qua các hiệu ứng tương đối tính.

(a) Tìm ba mức năng lượng thấp nhất E_0, E_1, E_2 và bâc suy biến tương ứng.

(b) Giả sử hạt chịu tác dụng của nhiễu loạn là một từ trường yếu, không đổi có độ lớn B, hướng theo trục z. Chỉ xét những trạng thái với năng lượng khi chưa có nhiễu loạn là E_2, hãy tìm bổ chính cho các mức năng lượng đó.

(c) Giả sử một thế nhiễu loạn nhỏ $Ax \cos \omega t$ gây ra chuyển dời giữa các mức khác nhau trong câu (a). Dùng hệ cơ sở thích hợp cho các trạng thái suy biến, hãy xác định chi tiết các quá trình chuyển dời được phép, bỏ qua các hiệu ứng tỉ lệ với A^2 và các bậc cao hơn của A.

(d) Trong câu (c), giả sử ở thời điểm $t = 0$ hạt ở trạng thái cơ bản. Tính xác suất để hạt có năng lượng E_1 ở thời điểm t.

(e) Với Hamiltonian không nhiễu loạn, các tích phân chuyển động là gì?

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Phương trình Schrödinger của hạt trong hệ toạ độ Đềcác,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + k(x^2 + y^2 + z^2)\right] \psi(x, y, z)$$
$$= E\psi(x, y, z)\,,$$

có thể rút gọn thành 3 phương trình dạng dao động tử điều hoà và năng lượng của hạt có thể viết dưới dạng tổng các năng lượng thành phần

$$E_N = E_l + E_m + E_n = \frac{3}{2}\hbar\omega + (l + m + n)\hbar\omega\,,$$

trong đó

$$\omega = \sqrt{2k/M}, \qquad N = l + m + n = 0, 1, 2, \ldots\,.$$

Vì vậy,

$$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega = \frac{3}{2}\hbar\sqrt{2k/M},$$

không suy biến;

$$E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega = \frac{5}{2}\hbar\sqrt{2k/M},$$

suy biến bậc 3 ($\psi_{100}, \psi_{010}, \psi_{001}$);

$$E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega = \frac{7}{2}\hbar\sqrt{2k/M},$$

suy biến bậc 6 ($\psi_{200}, \psi_{020}, \psi_{002}, \psi_{110}, \psi_{101}, \psi_{011}$).

Trong hệ toạ độ cầu hàm sóng có dạng

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{n_r l}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

trong đó

$$R_{n_r l}(r) = \alpha^{3/2}\left[\frac{2^{l+2-n_r}(2l+2n_r+1)!!}{\sqrt{\pi}\, n_r!\,[(2l+1)!!]^2}\right]^{1/2}(\alpha r)^l e^{-\alpha^2 r^2/2}$$
$$\times F(-n_r, l+3/2, \alpha^2 r^2),$$

$$l = N - 2n_r = \begin{cases} 0, 2, \dots N, & (N = \text{chẵn}), \\ 1, 3, \dots N, & (N = \text{lẻ}), \end{cases}$$

N liên hệ với năng lượng bởi hệ thức

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \qquad N = 0, 1, 2, \dots,$$

và bậc suy biến là $f_N = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)$.

(b) Với từ trường yếu B hướng theo trục z, Hamiltonian nhiễu loạn có dạng

$$H' = -\frac{eB}{2Mc}\hat{L}_z.$$

Do đó, trong hệ toạ độ cầu ta có

$$E_{nlm} = E_{nl} - \frac{eB}{2Mc}m\hbar,$$

trong đó $m\hbar$ là trị riêng của toán tử $\hat{L}_z$. Vì thế các trạng thái suy biến khác nhau của mức E_2 sẽ tách thành các mức với năng lượng

$$\begin{aligned}
E_{200} &= E_{20} \\
E_{222} &= E_{22} - \frac{eB}{Mc}\hbar\,, \\
E_{221} &= E_{22} - \frac{eB}{2Mc}\hbar\,, \\
E_{220} &= E_{22}\,, \\
E_{22-1} &= E_{22} + \frac{eB}{2Mc}\hbar\,, \\
E_{22-2} &= E_{22} + \frac{eB}{Mc}\hbar\,.
\end{aligned}$$

Ta thấy rằng suy biến chỉ bị mất đi một phần.

(c) Tại thời điểm $t = 0$, $H' = Ax\cos(\omega t)$. Xét dao động tử điều hoà 3 chiều trong hệ toạ độ Đềcác. Với l là số lượng tử của thành phần dao dộng dọc theo trục x, bổ chính bậc nhất của nhiễu loạn cho ta

$$\begin{aligned}
\langle l'm'n'|H'(x,\,t)|\,lmn\rangle &= \delta_{m'm}\delta_{n'n}\,\langle l'|H'(x,\,t)|l\rangle \\
&= A\,\cos(\omega t)\,\delta_{m'm}\delta_{n'n}\,\langle l'|x|l\rangle \\
&= A\,\alpha^{-1}\,\cos(\omega t)\,\left[\sqrt{\frac{l+1}{2}}\,\delta_{l',l+1} + \sqrt{\frac{l}{2}}\,\delta_{l',l-1}\right] \\
&\quad\times\ \delta_{m'm}\delta_{n'n}\,,
\end{aligned}$$

trong đó $\alpha = \sqrt{\frac{M\sqrt{2k/M}}{\hbar}} = (2kM/\hbar^2)^{1/4}$. Vì vậy, các quá trình chuyển dời được phép là các quá trình chuyển giữa các trạng thái sao cho

$$\Delta m = \Delta n = 0\,, \qquad \Delta l = \pm 1\,.$$

(d) Giữa các trạng thái E_0 và E_1, các quy tắc chọn lọc chỉ cho phép quá trình chuyển dời với $\psi_{000} \to \psi_{100}$. Xác suất chuyển dời là

$$P_{10} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t H'_{10}\,e^{i\omega' t'}\,dt'\right|^2 = \frac{A^2}{2\alpha^2\hbar^2}\left|\int_0^t \cos(\omega t')\,e^{i\omega' t'}\,dt'\right|^2,$$

trong đó

$$\omega' = \sqrt{\frac{2k}{M}}\,, \qquad H'_{10} = \langle 100|H'|000\rangle\,,$$

$$\int_0^t \cos(\omega t')\, e^{i\omega' t'}\, dt' = \frac{1}{2} \int_0^t \left(e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'}\right) e^{i\omega' t'}\, dt'$$
$$= \frac{1}{2i} \left[\frac{e^{i(\omega'+\omega)\,t} - 1}{\omega' + \omega} + \frac{e^{i(\omega'-\omega)\,t} - 1}{\omega - \omega'} \right] .$$

Trong thế giới vi mô, ω và ω' thường rất lớn. Chỉ khi nào $\omega \sim \omega'$ thì tích phân trên mới cho đóng góp đáng kể. Do vậy

$$P_{10} \approx \frac{A^2}{8\alpha^2\hbar^2} \frac{\sin^2\left[(\omega' - \omega)\, t/2\right]}{\left[(\omega' - \omega)/2\right]^2} ,$$

hay, khi t đủ lớn,

$$P_{10} \approx \frac{A^2 \pi t}{4\alpha^2\hbar^2}\, \delta(\omega' - \omega) .$$

Ở đây ta đã sử dụng công thức sau khi t lớn,

$$\left[\frac{\sin(x' - x)t/2}{(x' - x)/2}\right]^2 \approx 2\pi t \delta(x' - x) .$$

(e) Năng lượng, mômen xung lượng, thành phần hướng theo trục z của mômen xung lượng và tính chẵn lẻ là các tích phân chuyển động.

6055

(a) Giả sử trạng thái của một dao động tử điều hoà với tần số góc ω được mô tả bởi hàm sóng

$$\psi = N \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\, \psi_n(x) e^{-n\omega t} \qquad \alpha = x_0 \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, e^{i\phi} , \qquad N = e^{-|\alpha|^2/2} .$$

Hãy tính trung bình toạ độ $\langle x \rangle$ của dao động tử trong trạng thái này và chỉ ra rằng sự phụ thuộc vào thời gian của $\langle x \rangle$ cũng giống như dao động tử cổ điển với biên độ x_0 và pha ϕ.

(b) Hamiltonian của dao động tử điều hoà một chiều trong trường điện từ của laser được cho bởi

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{ep}{2m\omega} E_0 \sin \omega t - \frac{1}{2} e E_0 x \cos \omega t + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2 ,$$

trong đó ω_0, m và e tương ứng là tần số góc, khối lượng và điện tích của dao động tử và ω là tần số góc bức xạ laser.

Giả sử laser được bật lên vào thời điểm $t = 0$ khi dao động tử đang ở trạng thái cơ bản ψ_0. Coi tương tác điện từ như một nhiễu loạn, trong gần đúng bậc nhất hãy tìm xác suất để tại thời điểm $t > 0$ bất kì, dao động tử ở một trong các trạng thái kích thích ψ_n.

Biết rằng các hàm sóng chuẩn hoá của dao động tử $\psi_n(x)$ có tính chất sau

$$\left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)\psi_n = \sqrt{\frac{2\hbar n}{m\omega}}\,\psi_{n-1},$$

$$\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)\psi_n = \sqrt{\frac{2\hbar(n+1)}{m\omega}}\,\psi_{n+1}.$$

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Cộng hai phương trình đối với ψ_n cho trong đề bài, ta có

$$2x\psi_n = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\left(\sqrt{n}\,\psi_{n-1} + \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}\right),$$

hay là

$$x|n\rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega}\left(\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\right).$$

Từ đó, suy ra

$$\langle x\rangle = \langle\psi|x|\psi\rangle = N^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha^k}{\sqrt{k!}}e^{i(n-k)\omega t}\langle n|x|k\rangle$$

$$= N^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha^k}{\sqrt{k!}}e^{i(n-k)\omega t}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle n|\left[\sqrt{k}\,|k-1\rangle\right.$$

$$\left. + \sqrt{k+1}\,|k+1\rangle\right]$$

$$= N^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha^k}{\sqrt{k!}} e^{i(n-k)\omega t} (\sqrt{k}\,\delta_{k,n+1} + \sqrt{k+1}\,\delta_{k,n-1})$$

$$= N^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}} \cdot \frac{\alpha^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} \sqrt{n+1}\, e^{-i\omega t} + \frac{\alpha^{*(n+1)}}{\sqrt{(n+1)!}} \cdot \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n+1}\, e^{i\omega t}\right]$$

$$= N^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} (\alpha\, e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t})$$

$$= N^2 e^{|\alpha|^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t})$$

$$= \frac{1}{2} x_0 \left[e^{i(\phi-\omega t)} + e^{-i(\phi-\omega t)}\right]$$

$$= x_0 \cos(\phi - \omega t)\,.$$

Vậy, $\langle x\rangle$ giống như của dao động tử cổ điển với biên độ x_0 và pha ban đầu ϕ.

(b) Ban đầu dao động tử ở trạng thái $\psi_0 = |0\rangle$. Thay ω bằng ω_0, các phương trình đã cho đối với ψ_n cho ta

$$x\,|n\rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}\,(\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle)\,,$$

$$\hat{p}\,|n\rangle = i\,\sqrt{\hbar m\omega_0/2}\,(\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle - \sqrt{n}\,|n-1\rangle)\,,$$

trong đó $\hat{p} = -i\hbar\,\frac{d}{dx}$. Từ đây, suy ra

$$x\,|0\rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}\,|1\rangle\,,$$

$$\hat{p}\,|0\rangle = i\,\sqrt{\hbar m\omega_0/2}\,|1\rangle\,.$$

Hamiltonian nhiễu loạn có dạng

$$\hat{H}' = \frac{e\hat{p}}{2m\omega} E_0 \sin\omega t - \frac{1}{2} eE_0 x \cos\omega t\,.$$

Vì $\langle n\,|\,1\rangle = \delta_{n,1}$, $H'_{n0} = 0$ với $n \neq 1$. Vậy nên $P_{n0} = 0$ với $n > 1$. Xét H'_{10}. Ta có

$$H'_{10} = \left\langle 1 \left| \frac{e\hat{p}}{2m\omega} E_0 \sin \omega t - \frac{1}{2} eE_0 x \cos \omega t \right| 0 \right\rangle$$
$$= \frac{eE_0}{2} \left(\frac{i}{m\omega} \sqrt{\frac{\hbar m\omega_0}{2}} \sin \omega t - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \cos \omega t \right)$$
$$= \frac{eE_0}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \left(i \frac{\omega_0}{\omega} \sin \omega t - \cos \omega t \right) ,$$

vì thế xác suất để dao động tử chuyển lên trạng thái ψ_1 vào thời điểm t là

$$P_{10} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \frac{eE_0}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \left(i \frac{\omega_0}{\omega} \sin \omega t' - \cos \omega t' \right) e^{i\omega_0 t'} dt' \right|^2$$
$$= \frac{e^2 E_0^2}{8m\omega_0\hbar} \left| \int_0^t \left[\frac{\omega_0}{2\omega} \left(e^{i\omega t'} - e^{-i\omega t'}\right) - \frac{1}{2} \left(e^{i\omega t'} + e^{-i\omega_0 t'} \right) \right] e^{i\omega t'} dt' \right|^2$$
$$= \frac{e^2 E_0^2}{8m\omega_0\hbar} \left[\frac{1}{2\omega^2} + \frac{8\omega_0^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2} - \frac{1}{2\omega^2} \cos 2\omega t \right]$$
$$+ \frac{e^2 E_0^2}{4m\omega\hbar} \left[\frac{\cos(\omega_0 + \omega) t}{(\omega_0 + \omega)^2} - \frac{\cos(\omega_0 - \omega) t}{(\omega_0 - \omega)^2} \right] .$$

6056

Giả sử do tác dụng của một lực yếu vi phạm tính bảo toàn chẵn lẻ, mức $^2S_{1/2}$ của nguyên tử hydro có một thành phần nhỏ trộn lẫn với sóng P

$$\psi \left(n = 2,\ j = \frac{1}{2} \right) = \psi_s \left(n = 2,\ j = \frac{1}{2},\ l = 0 \right)$$
$$+ \varepsilon \psi_p \left(n = 2,\ j = \frac{1}{2},\ l = 1 \right) .$$

Quá trình bức xạ bậc nhất nào sẽ khử trạng thái kích thích này? Dạng của yếu tố ma trận ứng với quá trình này là gì? Nó sẽ có dạng như thế nào khi $\varepsilon \to 0$, tại sao?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Bức xạ bậc nhất liên quan đến quá trình chuyển dời lưỡng cực điện. Nó làm cho trạng thái trên chuyển thành trạng thái $\psi(n = 1,\ j = \frac{1}{2})$, suy biến bậc

2, tương ứng với $m_j = \pm\frac{1}{2}$, $l = 0$. Yếu tố ma trận của quá trình chuyển dời lưỡng cực điện như vậy được cho bởi công thức

$$H'_{12} = \left\langle \psi\left(n=1, j=\frac{1}{2}\right) | -e\mathbf{r} | \psi\left(n=2, j=\frac{1}{2}\right)\right\rangle$$
$$= \varepsilon\left\langle \psi\left(n=1, j=\frac{1}{2}\right) | -e\mathbf{r} | \psi_p\left(n=2, j=\frac{1}{2}, l=1\right)\right\rangle$$

do các quy tắc chọn lọc $\Delta l = \pm 1$ đối với quá trình chuyển dời. Biểu diễn các vectơ cơ sở trong trạng thái liên kết qua các trạng thái không liên kết, ta có các trạng thái cuối và trạng thái đầu sau đây

$$\psi\left(n=1, j=\frac{1}{2}, m_j=\frac{1}{2}\right) = |100\rangle \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},$$
$$\psi\left(n=1, j=\frac{1}{2}, m_j=-\frac{1}{2}\right) = |100\rangle \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},$$
$$\psi_p\left(n=2, j=\frac{1}{2}, l=1, m_j=\frac{1}{2}\right) = -\sqrt{\frac{1}{3}}\,|210\rangle \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \sqrt{\frac{2}{3}}\,|211\rangle \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},$$
$$\psi_p\left(n=2, j=\frac{1}{2}, l=1, m_j=-\frac{1}{2}\right) = -\sqrt{\frac{2}{3}}\,|21,-1\rangle \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|210\rangle \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Vậy các yếu tố ma trận khác không của H'_{12} là

$$\varepsilon\left\langle \psi\left(n=1, j=m_j=\frac{1}{2}\right) | -e\mathbf{r} | \psi_p\left(m_j=\frac{1}{2}\right)\right\rangle$$
$$= \sqrt{\frac{1}{3}}\,e\varepsilon\,\langle 100|\,\mathbf{r}\,|210\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\,e\varepsilon\,\langle 100|\,z\,|210\rangle\,\mathbf{e}_z$$
$$= \frac{e\varepsilon}{3}\,\langle 100|\,r\,|200\rangle\,\mathbf{e}_z = \frac{e\varepsilon A}{3}\,\mathbf{e}_z\,,$$

trong đó $A = \langle 100|\, r\, |200\rangle$, $\mathbf{e}_z$ là vectơ đơn vị dọc theo trục z,

$$\varepsilon \left\langle \psi \left(n = 1,\, j = \frac{1}{2},\, m_j = -\frac{1}{2}\right) |-e\mathbf{r}|\, \psi_p \left(m_j = \frac{1}{2}\right)\right\rangle$$

$$= -\sqrt{\frac{2}{3}}\, e\varepsilon \,\langle 100|\, \mathbf{r}\, |211\rangle$$

$$= -\sqrt{\frac{2}{3}}\, e\varepsilon \,\langle 100|\, x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y\, |211\rangle = -\frac{e\varepsilon A}{3}\,(e_x + i\mathbf{e}_y)\,,$$

$$\varepsilon \left\langle \psi \left(n = 1,\, j = m_j = \frac{1}{2}\right) |-e\mathbf{r}|\, \psi_p \left(m_j = -\frac{1}{2}\right)\right\rangle$$

$$= -\frac{e\varepsilon\, A}{3}\,(e_x - ie_y)\,,$$

$$\varepsilon \left\langle \psi \left(n = 1,\, j = \frac{1}{2},\, m_j = -\frac{1}{2}\right) |-e\mathbf{r}|\, \psi_p \left(m_j = -\frac{1}{2}\right)\right\rangle$$

$$= -\sqrt{\frac{1}{3}}\, e\varepsilon \,\langle 100|\, r\, |210\rangle = \frac{e\varepsilon A}{3}\, e_x\,.$$

ở trên ta đã sử dụng các hệ thức

$$(1\ 0)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 1, \qquad (1\ 0)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = 0\,, \qquad \text{v.v.,}$$

$$\mathbf{r} = x\,\mathbf{e}_x + y\,\mathbf{e}_y + z\,\mathbf{e}_z$$
$$= r\,\sin\theta\,\cos\varphi\,\mathbf{e}_x + r\,\sin\theta\,\sin\varphi\,\mathbf{e}_y + r\,\cos\theta\,\mathbf{e}_z\,,$$

$$\langle 100|z|210\rangle = \langle 100|r|200\rangle\,\langle \ell = 0,\, m = 0\,|\cos\theta\,|\,\ell = 1,\, m = 0\rangle\,, \quad \text{v.v.}$$

và các quy tắc chọn lọc

$\Delta m = 0$ với thành phần z của $e\mathbf{r}$,

$\Delta m = \pm 1$ với thành phần x, y của $e\mathbf{r}$.

Vì vậy, nếu tính chẵn lẻ của trạng thái $2\,^2S_{1/2}$ bị mất đi do sự xuất hiện của số hạng ε bức xạ lưỡng cực điện sẽ dẫn đến sự chuyển dời từ trạng thái 2 $^2S_{1/2}$ xuống trạng thái cơ bản 1 $^2S_{1/2}$, xác suất để khử trạng thái kích thích sẽ tỉ lệ với $\propto \varepsilon^2$. Nếu $\varepsilon = 0$ thì bức xạ lưỡng cực điện không gây chuyển dời từ trạng thái

$$\psi_s \left(n = 2,\, j = \frac{1}{2},\, l = 0\right) \quad \text{về trạng thái } \psi \left(n = 1,\, j = \frac{1}{2},\, l = 0\right)$$

nguyên nhân vì nhiễu loạn H' là một vectơ cực, các yếu tố ma trận của nó chỉ khác không khi $\Delta l = \pm 1$.

6057

(a) Thành phần của Hamiltonian mô tả tương tác siêu tinh tế giữa electron và proton trong nguyên tử hydro được cho bởi công thức

$$H' = -\frac{8\pi}{3}\boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_p \delta^3(\mathbf{r}),$$

trong đó $\boldsymbol{\mu}_i = \frac{e_i g_i}{2m_i c}\mathbf{S}_i$ là mômen từ và $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_i$ là spin của hạt thứ i ($\boldsymbol{\sigma}_i$ là các ma trận Pauli). Hãy tính độ tách siêu tinh tế giữa các trạng thái $1s\ ^3S_1$ và $1s\ ^1S_0$ của nguyên tử hydro. Trạng thái nào có năng lượng thấp hơn. Hãy giải thích điều đó bằng các lập luận vật lý.

(b) Thế vectơ của trường bức xạ được sinh ra trong quá trình chuyển dời giữa các trạng thái trong phần (a) có dạng tổng quát khi $r \to \infty$, như sau

$$\mathbf{A} = \left[-i\frac{\omega}{c}\langle\mathbf{x}\rangle + i\frac{\omega}{c}\hat{\mathbf{n}} \times \frac{e}{2m_e c}\langle\mathbf{L}\rangle + i\frac{\omega e}{2m_e c^2}\hat{\mathbf{n}} \times \langle\boldsymbol{\sigma}_e\rangle + \dots\right] \times \frac{e^{i\frac{\omega}{c}r - i\omega t}}{r},$$

trong đó $\hat{\mathbf{n}}$ là vectơ đơn vị dọc theo hướng truyền của bức xạ và $\langle\cdot\rangle$ kí hiệu yếu tố ma trận của quá trình chuyển dời này. Yếu tố ma trận nào của các số hạng trong biểu thức của A cho ở trên khác không? Số hạng nào thì bằng không? Tính chất đặc trưng của bức xạ phát ra trong quá trình chuyển dời trên là gì?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Gọi phần hàm sóng không gian của trạng thái $1s$ là $\psi_0(\mathbf{r})$, trạng thái spin đơn tuyến là χ_{00}, và trạng thái spin tam tuyến là χ_{1M} $(M = 0, \pm 1)$.

(a) Áp dụng phương pháp nhiễu loạn cho các trạng thái suy biến. Hamiltonian nhiễu loạn là

$$H' = \frac{2\pi}{3} \cdot \frac{e^2 g_e g_p}{m_e m_p c^2}\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{S}_p \delta^3(\mathbf{r}) = \frac{B}{2}[(\mathbf{S}_e + \mathbf{S}_p)^2 - \mathbf{S}_e^2 - \mathbf{S}_p^2]\delta^3(\mathbf{r}) = \frac{B}{2}\left[\mathbf{S}^2 - \frac{3}{2}\hbar^2\right]\delta^3(\mathbf{r}),$$

trong đó $B = \frac{2\pi}{3}\frac{e^2 g_e g_p}{m_e m_p c^2}$ và $\mathbf{S} = \mathbf{S}_e + \mathbf{S}_p$, với $S_e^2 = S_p^2 = \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}\hbar$. Nếu chọn $\psi_0(\mathbf{r})\,\chi_{00}$ và $\psi_0(\mathbf{r})\,\chi_{1M}$ làm hệ vectơ cơ sở, thì H' sẽ là một ma trận chéo. Với mức năng lượng $1s\ {}^1S_0$, $S = 0$, ta có

$$\begin{aligned}\Delta E_1 &= \langle \psi_0\chi_{00}|H'|\psi_0\chi_{00}\rangle \\ &= -\frac{3}{4}B\hbar^2\,|\,\psi_0(\mathbf{r}=0)\,|^2 .\end{aligned}$$

Với mức năng lượng $1s\ {}^3S_1$, $S^2 = 1(1+1)\,\hbar^2$ ta có

$$\Delta E_2 = \langle \psi_0\chi_{1M}|H'|\,\psi_0\chi_{1M}\rangle = \frac{1}{4}B\hbar^2\,|\,\psi_0(\mathbf{r}=0)\,|^2 .$$

Vì

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{2}{a^{3/2}}e^{-r/a}, \qquad |\psi_0\,(\mathbf{r}=0)|^2 = \frac{1}{\pi a^3}.$$

Cho nên độ tách siêu tinh tế là

$$\Delta E = \Delta E_2 - \Delta E_1 = \frac{1}{\pi a^3}B\hbar^2 .$$

Các tính toán ở trên chỉ ra rằng trạng thái spin đơn tuyến (${}^1S_0$) có năng lượng thấp hơn. Có thể giải thích điều đó như sau. Cường độ của trường sinh ra bởi lưỡng cực từ giảm rất nhanh khi khoảng cách tăng. Vì vậy, với tương tác lưỡng cực từ giữa electron và proton ta phải xét trường hợp khi chúng rất gần nhau. Khi $\boldsymbol{\mu}_e$ song song với $\boldsymbol{\mu}_p$, năng lượng của tương tác từ thấp hơn (vì $E = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}$) so với trường hợp chúng đối song. Vì khi $\boldsymbol{\mu}_e$ và $\boldsymbol{\mu}_p$ song song, thì $\mathbf{S}_e$ và $\mathbf{S}_p$ sẽ đối song. Khe năng lượng trong trạng thái đơn tuyến sẽ nhỏ hơn.

(b) Với quá trình chuyển dời từ trạng thái tam tuyến sang trạng thái đơn tuyến dưới tác dụng của thế vectơ $\mathbf{A}$, do các số hạng với $\hat{\mathbf{x}}$ và $\hat{\mathbf{L}}$ không chứa toán tử spin, ta có

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}\rangle &= \langle \psi_0\chi_{00}\,|\hat{\mathbf{x}}|\,\psi_0\chi_{1M}\rangle = \langle \psi_0|\hat{\mathbf{x}}|\psi_0\rangle\,\langle \chi_{00}\,|\,\chi_{1M}\rangle = 0\,,\\ \langle \mathbf{L}\rangle &= \langle \psi_0\chi_{00}\,|\hat{\mathbf{L}}\,|\psi_0\chi_{1M}\rangle = 0\,,\\ \langle \sigma_e\rangle &= \langle \psi_0\chi_{00}\,|\,\boldsymbol{\sigma}_e|\psi_0\chi_{1M}\rangle = \langle \chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_e|\chi_{1M}\rangle\,.\end{aligned}$$

Vì

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_e \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p - \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_e\right],$$

$$\chi_{11} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_e \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p,$$

$$\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_e \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p + \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_e\right],$$

$$\chi_{1,-1} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_e \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p,$$

nên nếu ta chọn trục z song song với $\mathbf{n}$ thì thành phần hướng theo trục z của $\langle\boldsymbol{\sigma}_e\rangle$ sẽ không cho đóng góp gì vào $\mathbf{n}\times\langle\boldsymbol{\sigma}_e\rangle$, vì vậy thực tế ta có

$$\langle\chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_e|\chi_{11}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(0\ \ 1)\,\boldsymbol{\sigma}_e\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_x - \frac{i}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_y,$$

$$\langle\chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_e|\chi_{1,-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1\ \ 0)\,\boldsymbol{\sigma}_e\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_x - \frac{i}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_y,$$

$$\langle\chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_e|\chi_{10}\rangle = \frac{1}{2}(1\ \ 0)\,\boldsymbol{\sigma}_e\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} - \frac{1}{2}(0\ \ 1)\,\boldsymbol{\sigma}_e\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \mathbf{e}_z,$$

trong đó $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$ lần lượt là các vectơ đơn vị dọc theo các trục x, y, z. Vì vậy, $\langle\boldsymbol{\sigma}_e\rangle \neq 0$. Cần chú ý rằng hướng của $\mathbf{A}$ song song với $\mathbf{n}\times\langle\boldsymbol{\sigma}_e\rangle$. Điều này tương tự như thế vectơ của bức xạ lưỡng cực từ, vì vậy bức xạ phát ra trong qúa trình chuyển dời trên có đặc trưng của bức xạ lưỡng cực từ.

6058

Các proton (có mômen từ μ) ở trong một từ trường có dạng

$$B_x = B_0\cos\omega t,\qquad B_y = B_0\sin\omega t,$$

$$B_z = \text{hằng số},\qquad B_0 \ll B_z.$$

Tại thời điểm $t = 0$ tất cả các proton đều phân cực dọc theo trục $+z$.

(a) Giá trị của ω bằng bao nhiêu để có chuyển dời cộng hưởng?

(b) Xác suất proton ở thời điểm t có spin hướng theo chiều âm trục z bằng bao nhiêu? (Giả thiết $B_0 \ll B_z$)

(Princeton)

Lời giải:

(a) Vì $B_0 \ll B_z$, $\mathbf{B}' = B_x\hat{\mathbf{x}} + B_y\hat{\mathbf{y}}$ có thể được xem như nhiễu loạn. Khi đó Hamiltonian không nhiễu loạn (phần phụ thuộc spin) $H_0 = -\mu B_z \sigma_z$ cho ta hiệu hai mức năng lượng của hai trạng thái $\binom{1}{0}$ và $\binom{0}{1}$ với spin hướng theo $+z$ và $-z$ là $2\mu B_z$. Vậy, chuyển dời cộng hưởng xảy ra với tần số góc $\omega - 2\mu B_z/\hbar$.

(b) Vì

$$\begin{aligned} H &= -\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \\ &= -\mu \left(\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z\right) \\ &= -\mu \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

nên phương trình Schrödinger có thể viết dưới dạng

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} B_z & B_0 e^{-i\omega t} \\ B_0 e^{i\omega t} & -B_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

trong đó a và b lần lượt là các biên độ xác suất để electron có spin hướng theo $+z$ và $-z$. Đặt

$$a = e^{-i\frac{\omega}{2}t} f, \qquad b = e^{i\frac{\omega}{2}t} g,$$

ta thu được phương trình cho f và g

$$\hbar \frac{\omega}{2} f + i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} + \mu B_z f + \mu B_0 g = 0, \tag{1}$$

$$\mu B_0 f + i\hbar \frac{\partial g}{\partial t} - \hbar \frac{\omega}{2} g - \mu B_z g = 0. \tag{2}$$

Lấy đạo hàm theo thời gian của phương trình (2) rồi thay các biểu thức của $\frac{\partial f}{\partial t}$, $\frac{\partial g}{\partial t}$ rút ra từ (1) và (2) vào, ta thu được

$$\frac{\partial^2 g}{\partial t^2} + \Omega^2 g = 0, \tag{3}$$

trong đó

$$\Omega^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left[\mu^2 B_0^2 + \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \mu B_z\right)^2\right].$$

Ban đầu tại $t = 0$ các proton phân cực dọc theo hướng $+z$. Vì vậy, $|f| = 1$, $g = 0$. Do đó, nghiệm của phương trình (3) là $g = A \sin \Omega t$, trong đó A là một hằng số. Giả thiết rằng $f = B \sin \Omega t + C \cos \Omega t$ và thay các hệ thức trên vào (1). Giả sử $f = i$ tại $t = 0$, ta có

$$C = i, \qquad B = -\frac{1}{\hbar\Omega}\left(\frac{\hbar\omega}{2} + \mu B_z\right), \qquad A = -\frac{\mu B_0}{\hbar\omega}.$$

Vậy

$$f = -\frac{1}{\hbar\Omega}\left(\hbar\frac{\omega}{2} + \mu B_z\right)\sin \Omega t + i\cos \Omega t,$$

$$g = \frac{-\mu B_0}{\hbar\Omega}\sin \Omega t.$$

Do đó, xác suất proton có spin hướng theo $-z$ tại thời điểm t là

$$P = |b|^2 = |g|^2 = \left(\frac{\mu B_0}{\hbar\Omega}\right)^2 \sin^2 \Omega t$$

với

$$\Omega = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\mu^2 B_0^2 + \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \mu B_z\right)^2} \approx \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\hbar\omega}{2} + \mu B_z\right) \quad \text{vì} \quad B_z \gg B_0.$$

6059

Một mẫu paraphin được đặt trong từ trường đều H_0. Mẫu này bao gồm nhiều hạt nhân hydro. Spin của mỗi hạt nhân hầu như không tương tác với các hạt nhân xung quanh và trong gần đúng bậc nhất có thể chỉ xét tương tác với từ trường ngoài.

(a) Đưa ra biểu thức cho số proton trong các trạng thái từ khác nhau ở nhiệt độ T.

(b) Một ống dây với tần số vô tuyến được đưa vào để quan sát hấp thụ cộng hưởng sinh ra bởi một từ trường dao động. Từ trường dao động phải có hướng như thế nào so với hướng của từ trường tĩnh H_0 và tại sao?

(c) Với tần số nào thì quan sát được hấp thụ cộng hưởng. Hãy chọn đơn vị của các đại lượng trong biểu thức tìm được sao cho tần số có đơn vị MHz.

(d) Dựa trên cơ chế chuyển dời spin proton, hãy giải thích tại sao quá trình hấp thụ năng lượng của trường với tần số vô tuyến không biến mất sau xung ban đầu, mà trên thực tế lại tiếp tục với tốc độ không đổi. Khi cường độ của trường dao động tăng đến giá trị rất lớn thì tốc độ hấp thụ sẽ thay đổi như thế nào? Giải thích vì sao?

(*CUS*)

Lời giải:

(a) Vì spin của hạt nhân hydro được giả thiết là chỉ tương tác với trường ngoài, Hamiltonian tương tác có dạng

$$\hat{H} = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_0 = -g\mu_N \hat{s}_z H_0 ,$$

nếu chọn trục z là hướng của từ trường $\mathbf{H}_0$. Khi đó có các trạng thái $|s_z = \frac{1}{2}\rangle$ và $|s_z = -\frac{1}{2}\rangle$ với năng lượng tương ứng

$$E_{1/2} = -\frac{1}{2} g\mu_N H_0, \qquad E_{-1/2} = \frac{1}{2} g\mu_N H_0 ,$$

trong đó $g = 5,6$ là một hằng số và μ_N là mômen từ hạt nhân $\mu_N = e\hbar/2m_pc$.

Điều kiện cân bằng thống kê ở nhiệt độ T cho ta các xác suất để hạt nhân ở một trong hai trạng thái trên như sau

với $|s_z = \frac{1}{2}\rangle$:

$$P = \exp\left(\frac{1}{2} g\mu_N H_0/kT\right) \Big/ \left[\exp\left(\frac{1}{2} g\mu_N H_0/kT\right) + \exp\left(-\frac{1}{2} g\mu_N H_0/kT\right)\right],$$

với $|s_z = -\frac{1}{2}\rangle$:

$$P = \exp\left(-\frac{1}{2} g\mu_N H_0/kT\right) \Big/ \left[\exp\left(\frac{1}{2} g\mu_N H_0/kT\right) + \exp\left(-\frac{1}{2} g\mu_N H_0/kT\right)\right],$$

đây đồng thời cũng là tỉ lệ các hạt nhân ở hai trạng thái trên.

(b) Từ trường dao động $\mathbf{H}_1$ phải trực giao với $\mathbf{H}_0$, nghĩa là hướng dọc theo trục x. Nguyên nhân là do chỉ khi phần phụ thuộc spin của Hamiltonian có dạng

$$\hat{H} = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{H} = -g\mu_N s_z H_0 - g\mu_N s_x H_1$$

thì các yếu tố ma trận $\langle s_z = \frac{1}{2} | \hat{H} | s_z = -\frac{1}{2} \rangle$ và $\langle s_z = -\frac{1}{2} | \hat{H} | s_z = \frac{1}{2} \rangle$ mới khác không và các quá trình chuyển dời giữa các trạng thái spin mới xảy ra, bởi vì

$$\left\langle \frac{1}{2} \middle| s_z \middle| -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} (1\ 0) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 ,$$

$$\left\langle \frac{1}{2} \middle| s_x \middle| -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} (1\ 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} .$$

(c) Quá trình hấp thụ cộng hưởng chỉ xảy ra khi tần số dao động thoả mãn điều kiện

$$\hbar\omega = E_{-1/2} - E_{1/2} ,$$

hay là

$$\omega = g\mu_N H_0/\hbar .$$

Với $g = 5,6$, $\hbar = 1,054 \times 10^{-34}$ Js,

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c} = \frac{e\hbar}{2m_e c}\frac{m_e}{m_p} = \frac{9,274 \times 10^{-28}}{1836} \text{ J Gs}^{-1} ,$$

và ω trong đơn vị MHz được cho bởi

$$\omega = \frac{5,6}{1836} \times \frac{9,274 \times 10^{-28}}{1,054 \times 10^{-34}} \times 10^{-6} H_0 = 2,7 \times 10^{-2} H_0 .$$

trong đó H_0 tính bằng gauss.

(d) Tương tác spin giữa các proton có xu hướng giữ nguyên trạng thái cân bằng nhiệt, vì vậy ngay cả khi trường ngoài thôi tác dụng thì tương tác từ giữa proton và từ trường gây ra bởi các proton khác vẫn tồn tại và các quá trình chuyển dời vẫn xảy ra. Khi từ trường ngoài rất mạnh thì tốc độ hấp thụ sẽ bão hoà.

6060

Một electron liên kết ở trạng thái cơ bản trong một hố thế

$$V = \begin{cases} -\dfrac{\beta}{x}, & x > 0 , \\ \infty, & x < 0 , \end{cases}$$

không phụ thuộc vào y và z. Tìm tiết diện tán xạ của quá trình hấp thụ một sóng ánh sáng phẳng có năng lượng $\omega\hbar$, lan truyền theo hướng **k**, trạng thái phân cực ε. Xác định trạng thái cuối của electron, biết rằng

$$\frac{\beta^2 m}{\hbar^2} \ll \hbar\omega \ll mc^2 .$$

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Vì ban đầu electron chuyển động tự do theo các hướng y, z, trạng thái ban đầu của electron được mô tả bởi hàm sóng

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{x}) \exp\left(\frac{i(p_y y + p_z z)}{\hbar}\right),$$

với

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\varphi}{dx^2} - \dfrac{\beta}{x}\varphi = E\varphi, & x > 0, \\ \varphi = 0, & x < 0. \end{cases}$$

Phương trình đối với φ giống như phương trình đối với hàm sóng xuyên tâm của nguyên tử hydro với $\ell = 0$. Vì vậy, ta có

$$E_n = -\frac{m\beta^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \qquad n = 1, 2, \ldots .$$

Do đó trạng thái cơ bản (ban đầu) của chuyển động theo trục x có năng lượng và hàm sóng tương ứng là

$$E_1 = -\frac{m\beta^2}{2\hbar^2},$$

$$\varphi_1(\mathbf{x}) = \frac{2x}{a^{3/2}} e^{-x/a}, \quad \mathbf{x} > 0,$$

trong đó

$$a = \frac{\hbar^2}{m\beta}.$$

Điều kiện $\hbar\omega \gg \frac{m\beta^2}{\hbar^2} \approx |E_1|$ có nghĩa là năng lượng photon lớn hơn năng lượng liên kết trung bình của electron rất nhiều và do vậy có thể làm cho electron thoát khỏi hố thế. Tuy nhiên, vì $\hbar\omega \ll mc^2$, năng lượng này thấp hơn

rất nhiều so với năng lượng nghỉ của electron và do đó không thể tạo thành cặp electron được. Vậy trạng thái ban đầu của electron là

$$\psi_i(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r}|i\rangle = C\varphi_1(x)\ \exp\left[i(k_y^{(e)}y + k_z^{(e)}z)\right],$$

trong đó $k_y^{(e)} = p_y/\hbar$, $k_z^{(e)} = p_z/\hbar$ lần lượt là số sóng của electron tương ứng theo hướng y, z, $C = (\frac{1}{\sqrt{L}})^2 = \frac{1}{L}$ nếu hàm sóng của trạng thái ban đầu được chuẩn hoá với một electron ở trong hộp 2 chiều kích thước L trong mặt phẳng $y - z$. Trạng thái cuối của electron đang xét chính là trạng thái của electron tự do chuyển động theo hướng $\mathbf{k}_f^{(e)}$ (hướng quan sát)

$$\psi_f(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r}|f\rangle = \left(\frac{1}{L}\right)^{3/2} \exp(i\mathbf{k}_f^{(e)} \cdot \mathbf{r}),$$

trong đó L^3 là thể tích hộp ba chiều dùng để chuẩn hoá. Hamiltonian nhiễu loạn có dạng

$$\begin{aligned} H' = H - H_0 &= \left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + V\right\} - \left\{\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2 + V\right\} \\ &\simeq \frac{e}{mc}\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}\,. \end{aligned}$$

trong đó $\mathbf{A}$ là thế vectơ của trường photon và điện tích của electron là $-e$. Ở trên ta đã chọn chuẩn $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ và bỏ qua các số hạng bậc cao hơn A^2. Kí hiệu điện trường ban đầu tương ứng là

$$\mathbf{E} = E\boldsymbol{\varepsilon}\ \sin(\omega t - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} + \delta_0)\,,$$

trong đó $\mathbf{k}_i$ là vectơ sóng của photon tới và $\boldsymbol{\varepsilon} = \{\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z,\}$ là vectơ đơn vị theo hướng của $\mathbf{E}$. Có thể đặt thế vectơ bằng

$$\mathbf{A} = \frac{cE}{\omega}\boldsymbol{\varepsilon}\ \cos(\omega t - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} + \delta_0)$$

vì $\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$, và khi đó Hamiltonian nhiễu loạn được viết thành

$$\begin{aligned} H' \simeq \frac{e}{mc}\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} = \frac{-i\hbar e}{2m\omega}&\{\exp\left[i(\omega t - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} + \delta_0)\right] \\ &+ \exp\left[-i(\omega t - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} + \delta_0)\right]\}E\boldsymbol{\varepsilon}\nabla\,. \end{aligned}$$

Trong quá trình hấp thụ photon, $E_f > E_i$ nên ta chỉ cần xét số hạng thứ hai (số hạng thứ nhất tương ứng với quá trình phát xạ photon). Vậy nên Hamiltonian nhiễu loạn có dạng

$$H' = \frac{-i\hbar e}{2m\omega} \exp\left[-i(\omega t - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} + \delta_0)\right] E\varepsilon\nabla \,.$$

Với sóng điện từ phẳng,

$$\mathbf{H} = \frac{1}{k}\,\mathbf{k} \times \mathbf{E} \,,$$

nên vectơ Poynting là

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}) = \frac{c}{4\pi k} E^2\mathbf{k} \,.$$

Lấy trung bình theo thời gian ta có

$$\bar{S} = \frac{cE^2}{8\pi} \,.$$

Vì thế số photon tới đi qua một đơn vị diện tích trong một đơn vị thời gian là

$$n = \frac{\bar{S}}{\hbar\omega} = \frac{cE^2}{8\pi\hbar\omega} \,.$$

Tiết diện hấp thụ vi phân của hiệu ứng quang điện được cho bởi công thức

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f} = \frac{\omega_{i\to f}}{n} \,,$$

trong đó $\omega_{i\to f}$ là số electron trong góc khối $d\Omega_f$ chuyển từ trạng thái đầu sang trạng thái cuối f có năng lượng xấp xỉ E_f trong một đơn vị thời gian. Lý thuyết nhiễu loạn bậc nhất cho ta xác suất chuyển dời trong một đơn vị thời gian là

$$\omega_{i\to f}\, d\Omega_f = \frac{2\pi}{\hbar}\,\rho(E_f)\,|W_{fi}|^2\, d\Omega_f \,,$$

trong đó $\rho(E_f)$ là mật độ trạng thái cuối trên một khoảng đơn vị năng lượng.

Với các electron phi tương đối tính,

$$\rho = \frac{mk_f^{(e)}L^3}{8\pi^3\hbar^2} \,,$$

trong đó $k_f^{(e)}$ là số sóng của electron trong trạng thái cuối với năng lượng gần bằng E_f,

$$W_{fi} = \langle f|H'|i\rangle = \left\langle f \left| \frac{-i\hbar e}{2m\omega} \exp[-i(-\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} + \delta_0)] E\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \nabla \right| i \right\rangle$$

$$= \frac{-i\hbar e}{2m\omega} e^{-i\delta_0} \int_0^{+\infty} dx \iint_{-\infty}^{+\infty} dy\, dz \cdot L^{-3/2}$$

$$\times \exp[-i\mathbf{k}_f^{(e)} \cdot \mathbf{r} + i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}] (E\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \nabla) C\varphi_1(x)$$

$$\times \exp[i(k_y^{(e)} y + k_z^{(e)} z)]$$

$$= \frac{-i\hbar e C E e^{-i\delta_0}}{2m\omega} L^{-3/2} \int dx\, dy\, dz \left\{ \varepsilon_x \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{a} \right) \right.$$

$$\left. + i\varepsilon_y k_y^{(e)} + i\varepsilon_z k_z^{(e)} \right\} \varphi_1(\mathbf{x}) \exp[-i\mathbf{k}_f^{(e)} \cdot \mathbf{r} + i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}]$$

$$\times \exp[i(k_y^{(e)} y + k_z^{(e)} z)]$$

$$= \frac{4\pi^2 \sqrt{a}\, \hbar e E e^{-i\delta_0}}{m\omega L^{5/2}[1 + ia(k_x^{(f)} - k_x^{(i)})]^2} \{\varepsilon_x (k_x^{(f)} - k_x^{(i)})$$

$$- \varepsilon_y k_y^{(e)} - \varepsilon_z k_z^{(e)}\} \delta(-k_y^{(f)} + k_y^{(i)}$$

$$+ k_y^{(e)}) \delta(-k_z^{(f)} + k_z^{(i)} + k_z^{(e)}).$$

Vậy tiết diện hấp thụ vi phân là

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f} = \frac{8\pi a k_f e^2}{m\omega c(1 + a^2\Delta^2)^2} [\varepsilon_x \Delta - \varepsilon_y k_y^{(e)} - \varepsilon_z k_z^{(e)}]^2$$

$$\times \delta(k_y^{(i)} + k_y^{(e)} - k_y^{(f)}) \delta(k_z^{(i)} + k_z^{(e)} - k_z^{(f)}).$$

Trong tính toán ở trên, ta đã thay đổi các kí hiệu

$$\mathbf{k}_f^{(e)} \to \mathbf{k}^f \equiv \{k_x^{(f)}, k_y^{(f)}, k_z^{(f)}\}, \ \mathbf{k}_i \to \mathbf{k}^{(i)} \equiv \{k_x^{(i)}, k_y^{(i)}, k_z^{(i)}\},$$

$$k_x^{(f)} - k_x^{(i)} = \Delta$$

và sử dụng

$$[\delta(k_y^{(i)} + k_y^{(e)} - k_y^{(f)})]^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-L/2}^{L/2} \delta(k_y^{(i)} + k_y^{(e)} - k_y^{(f)}) \times \exp\left[iy\,(k_y^{(i)} + k_y^{(e)} - k_y^{(f)})\right] dy = \frac{L}{2\pi}\, \delta(k_y^{(i)} + k_y^{(e)} - k_y^{(f)}),$$

và

$$[\delta(k_z^{(i)} + k_z^{(e)} - k_z^{(f)})]^2 = \frac{L}{2\pi}\, \delta(k_z^{(i)} + k_z^{(e)} - k_z^{(f)}).$$

Chú ý rằng hai hàm δ ở trên mô tả sự bảo toàn của xung lượng theo các hướng y và z. Đồng thời, điều kiện bảo toàn năng lượng đòi hỏi

$$\frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} = E_1 + \frac{\hbar^2 (k_y^{(e)^2} + k_z^{(e)^2})}{2m} + \hbar\omega = -|E_1| + \frac{\hbar^2 (k_y^{(e)^2} + k_z^{(e)^2})}{2m} + \hbar\omega.$$

Các hàm δ ngụ ý rằng các thành phần dọc theo trục y và z của $\mathbf{k}_f$ được giữ cố định, và thành phần theo trục x của $\mathbf{k}_f$ cũng vậy. Nguyên nhân vật lý của sự xuất hiện hàm δ trong hệ thức của tiết diện hấp thụ vi phân là vì khi một electron với xung lượng xác định theo hướng y và z tán xạ với một photon tới cũng có xung lượng xác định, thì các định luật bảo toàn năng lượng và xung lượng đòi hỏi hướng tán xạ của electron trong trạng thái cuối phải được giữ không đổi. Để tìm tiết diện hấp thụ toàn phần, ta chú ý rằng

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{\alpha}\, \delta(x)$$

do đó

$$\begin{cases} \delta(k_y^{(f)} - k_y^{(i)} - k_y^{(e)}) = \dfrac{1}{k_f}\, \delta\left(\sin\theta_f \sin\varphi_f - \dfrac{k_y^{(i)} + k_y^{(e)}}{k_f}\right), \\ \delta(k_z^{(f)} - k_z^{(i)} - k_z^{(e)}) = \dfrac{1}{k_f}\, \delta\left(\cos\theta_f - \dfrac{k_z^{(i)} + k_z^{(e)}}{k_f}\right). \end{cases}$$

Vậy tiết diện hấp thụ toàn phần là

$$\sigma_a = \int \frac{d\sigma}{d\Omega_f} d\Omega_f$$

$$= \frac{8\pi a e^2 k_f}{m\omega c} \int \frac{1}{k_f^2} \left[\frac{\varepsilon_z(k_f \sin\theta_f \cos\varphi_f - k_x^{(i)}) - \varepsilon_y k_y^{(e)} - \varepsilon_z k_z^{(e)}}{1 + a^2 (k_f \sin\theta_f \cos\varphi_f - k_x^{(i)})^2} \right]^2$$

$$\times \delta\left(\sin\theta_f \sin\varphi_f - \frac{k_y^{(i)} + k_y^{(e)}}{k_f} \right) \delta\left(\cos\theta_f - \frac{k_z^{(i)} + k_z^{(e)}}{k_f} \right)$$

$$\times \sin\theta_f \, d\theta_f \, d\varphi_f$$

$$= \frac{8\pi a e^2}{m\omega c k_f} \int_0^{2\pi} \left[\frac{\varepsilon_x(k_f \sin\theta_f \cos\varphi_f - k_x^{(i)}) - \varepsilon_y k_y^{(e)} - \varepsilon_z k_z^{(e)}}{1 + a^2 (k_f \sin\theta_f \cos\varphi_f - k_x^{(i)})^2} \right]^2$$

$$\times \frac{\delta\left(\sin\varphi_f - \dfrac{k_y^{(i)} + k_y^{(e)}}{k_f \sin\theta_f} \right) \dfrac{d(\sin\varphi_f)}{\cos\varphi_f}}{\sin\theta_f}$$

$$= \frac{8\pi a e^2}{m\omega c k_f} \cdot \left[\frac{\varepsilon_x(k_f \sin\theta_f \cos\varphi_f - k_x^{(i)}) - \varepsilon_y k_y^{(e)} - \varepsilon_z k_z^{(e)}}{1 + a^2 (k_f \sin\theta_f \cos\varphi_f - k_x^{(i)})^2} \right]^2 .$$

$$\times \frac{1}{\sin\theta_f \cdot \cos\varphi_f},$$

trong đó

$$\cos\theta_f = \frac{k_z^{(i)} + k_z^{(e)}}{k_f}, \qquad \sin\theta_f = \frac{\sqrt{k_f^2 - (k_z^{(i)} + k_z^{(e)})^2}}{k_f},$$

$$\cos\varphi_f = \frac{\sqrt{k_f^2 \sin^2\theta_f - (k_y^{(i)} + k_y^{(e)})^2}}{k_f \sin\theta_f}.$$

$$\sin\varphi_f = \frac{k_y^{(i)} + k_y^{(e)}}{k_f \sin\theta_f}.$$

Cuối cùng, ta thu được

$$\sigma_a = \frac{8\pi a e^2}{m\omega c} \frac{1}{\sqrt{k_f^2 - (k_y^{(i)} + k_y^{(e)})^2 - (k_z^{(i)} + k_z^{(e)})^2}}$$
$$\times \varepsilon_x \left[\sqrt{k_f^2 - (k_y^{(i)} + k_y^{(e)})^2 - (k_z^{(i)} + k_z^{(e)})^2} - k_x^{(i)}\right]$$
$$\times \left\{ \frac{\varepsilon_y k_y^{(e)} + \varepsilon_z k_z^{(e)}}{1 + a^2 \left[\sqrt{k_f^2 - (k_y^{(i)} + k_y^{(e)})^2 - (k_z^{(i)} + k_z^{(e)})^2} - k_x^{(i)}\right]^2} \right\}^2 .$$

6061

Một hệ hai hạt không phân biệt được, spin mỗi hạt bằng 1/2 được mô tả bởi Hamiltonian

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + \frac{1}{2}\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\omega^2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2 + g\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$$

với $g \ll \hbar\omega$.

(a) Xác định các mức năng lượng của hệ. Đưa ra dạng cụ thể của hàm sóng cho hai trạng thái có năng lượng thấp nhất (không cần chuẩn hoá).

(b) Hệ ở trạng thái cơ bản khi $t \to -\infty$. Đưa vào một thế ngoài phụ thuộc thời gian có dạng

$$V(t) = \left[V_1 + V_2 \frac{z_1 - z_2}{L}\right] f(t)\, \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \hat{\mathbf{x}}$$

với $f(t) = 0$ khi $|t| \to \infty$. Hãy dẫn ra hệ phương trình cho các biên độ xác suất $C_n(t) = \langle n|\psi(t)\rangle$, trong đó $|n\rangle$ kí hiệu trạng thái riêng của H_0 và $\psi(t)$ là hàm sóng phụ thuộc thời gian.

(c) Hãy tính $C_n(\infty)$ trong trường hợp

$$f(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \quad \text{và} \quad t > \tau, \\ 1, & 0 < t < \tau \end{cases}$$

với $\frac{g\tau}{\hbar} \ll 1$ và V_2 rất nhỏ. Hãy tính đến gần đúng bậc nhất của V_2 và nêu rõ các số lượng tử đặc trưng các trạng thái đó. (*MIT*)

Lời giải:

(a) Kí hiệu

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\,,$$

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}\,,$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)\,.$$

Khi đó Hamiltonian của hệ có thể đưa về dạng

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + \frac{\mu}{2}\omega^2 r^2 + 2g\left[S(S+1) - \frac{3}{2}\right],$$

trong đó $M = m_1 + m_2$, $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$, S là spin toàn phần.

Chú ý rằng trong biểu thức của H, số hạng thứ nhất là do chuyển động của hệ như một tổng thể, số hạng thứ hai và thứ ba hợp lại là Hamiltonian của dao động tử điều hoà đẳng hướng có spin bằng 0, và số hạng cuối cùng là do spin của các hạt. Vậy, năng lượng của hệ là

$$E_{nS} = \frac{P^2}{2M} + \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega + 2g\left[S(S+1) - \frac{3}{2}\right],$$

$$n = 0,\ 1,\ 2, \ldots\,.$$

Với các mức năng lượng của chuyển động nội tại, ta sẽ bỏ đi số hạng thứ nhất trong vế phải của hệ thức trên. Đối với trạng thái cơ bản của chuyển động nội tại, $n = 0$, $S = 0$ và

$$E_{00} = \frac{3}{2}\hbar\omega - 3g\,.$$

Hàm sóng trạng thái cơ bản được viết dưới dạng $\psi_0 = |0\rangle\,\alpha_{00}$. Tương tự ta có cho trạng thái kích thích thứ nhất

$$E_{01} = \frac{3}{2}\hbar\omega + g, \qquad \psi_1 = |0\rangle\,\alpha_{10},\ \alpha_{1,\pm 1}\,.$$

Chú ý rằng $|0\rangle$ là hàm sóng ứng với trạng thái cơ bản của dao động tử điều hoà và α_{SM} là hàm sóng spin của hệ hai hạt.

(b) Đặt

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + \frac{\mu}{2}\omega^2 r^2 + 2g\left[S(S+1) - \frac{3}{2}\right],$$

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle,$$

$$[H_0 + V(t)]\psi(t) = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

Khai triển $\psi(t)$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)\exp(-iE_n t/\hbar)|n\rangle,$$

và thay vào phương trình cuối ta được

$$[H_0 + V(t)]\sum_n C_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle = i\hbar\sum_n \dot{C}_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle + i\hbar\sum_n C_n\left(\frac{-iE_n}{\hbar}\right)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|n\rangle.$$

Nhân cả hai vế với $\langle m|e^{i\frac{E_m t}{\hbar}}$ và lấy tổng theo m ta thu được

$$\sum_m C_m E_m + \sum_m\sum_n C_n e^{i\frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}}\langle m|V(t)|n\rangle = i\hbar\sum_m \dot{C}_m + i\hbar\sum_m C_m\left(\frac{-iE_m}{\hbar}\right),$$

hay là

$$i\hbar\dot{C}_n(t) = \sum_m \langle n|V(t)|m\rangle\exp[-i(E_m - E_n)t/\hbar]\,C_m(t),$$

Đây chính là hệ phương trình cần tìm.

(c) Kí hiệu trạng thái đầu là $|000\alpha_{00}\rangle$, trạng thái cuối là $|nlm\alpha_{SM}\rangle$. Vì

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\hat{\mathbf{x}} = \sin\theta\cos\varphi\,\sigma_{1x} + \sin\theta\sin\varphi\,\sigma_{1y} + \cos\theta\,\sigma_{1z};$$

$$\alpha_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2),$$

$$\alpha_{11} = \alpha_1\alpha_2, \qquad \alpha_{1,-1} = \beta_1\beta_2,$$

$$\alpha_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1);$$

$$\sigma_{1x}\alpha_1 = \beta_1, \quad \sigma_{1y}\alpha_1 = i\beta_1, \quad \sigma_{1z}\alpha_1 = \alpha_1; \quad \sigma_{1x}\beta_1 = \alpha_1,$$

$$\sigma_{1y}\beta_1 = -i\alpha_1, \quad \sigma_{1z}\beta_1 = -\beta_1;$$

nên ta có

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \hat{\mathbf{x}}\alpha_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sin\theta\, e^{i\varphi}\alpha_{1,-1} - \sin\theta\, e^{-i\varphi}\alpha_{11} + \sqrt{2}\cos\theta\alpha_{10}).$$

Vì $Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\varphi}$, $Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\varphi}$, $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$, nên từ đó ta thu được

$$\begin{aligned}\langle nlm\alpha_{SM}\,|\,\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\hat{\mathbf{x}}\,|\,\alpha_{00}000\rangle &= \left\langle nlm\alpha_{SM}\right|\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{11}\alpha_{1,-1} \\ &\quad - \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,-1}\alpha_{11} + \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}\alpha_{10}\,|000\rangle \\ &= \sqrt{\frac{1}{3}}\delta_{n0}\delta_{l1}\delta_{S1}\,(\delta_{m0}\,\delta_{M0} - \delta_{m1}\,\delta_{M,-1} \\ &\quad - \delta_{m1}\,\delta_{M1}) \equiv 0,\end{aligned}$$

do $\ell = 0$ khi $n = 0$. Vậy, nếu tính đến gần đúng bậc nhất của nhiễu loạn thì số hạng đầu tiên $V_1 f(t)\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\hat{\mathbf{x}}$ trong $V(t)$ không cho đóng góp vào quá trình chuyển dời. Tiếp theo ta xét

$$\begin{aligned}&\langle nlm\alpha_{SM}\,|\,r\cos\theta\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\hat{\mathbf{x}}\,|\,\alpha_{00}\,000\rangle \\ &= \left\langle nlm\alpha_{SM}\right| r\left(-\sqrt{\frac{4\pi}{15}}Y_{21}\alpha_{1,-1} - \sqrt{\frac{4\pi}{15}}Y_{2,-1}\alpha_{11}\right. \\ &\quad \left.+ \frac{1}{3}\sqrt{\frac{16\pi}{5}}Y_{20}\alpha_{10} + \frac{1}{3}\alpha_{10}\right)\left|000\right\rangle \\ &= \lambda_1\delta_{l2}\delta_{S1}\left[\frac{2}{3\sqrt{5}}\delta_{m0}\,\delta_{M0} - \frac{1}{\sqrt{15}}\delta_{m1}\,\delta_{M,-1}\right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\sqrt{15}}\delta_{m,-1}\delta_{M1}\right] + \frac{1}{3}\lambda_1\delta_{l0}\delta_{S1}\,\delta_{m0}\delta_{M0},\end{aligned}$$

trong đó

$$\lambda_1 = \int_0^\infty R_{nl}\cdot R_{00}\cdot r^3\,dr = \int_0^\infty R_{n2}\,R_{00}\,r^3\,dr.$$

Với dao động tử 3 chiều, $n = l + 2n_r = 2(1 + n_r)$ = chẵn. Ta có

$$
\begin{aligned}
C_n(\infty) &= \frac{1}{i\hbar}\int_0^\infty e^{i\omega_{n0}t}\,\langle nlm\alpha_{SM}|V(t)\,|000\alpha_{00}\rangle\,dt \\
&= \frac{1}{i\hbar}\int_0^\tau e^{in\omega t}\,dt\left\langle nlm\alpha_{SM}\right|\left(V_1 + V_2\,\frac{z}{L}\right)\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\hat{\mathbf{x}}|000\alpha_{00}\rangle \\
&= \frac{1}{n\omega\hbar}\left(e^{in\omega\tau}-1\right)\left\langle nlm\alpha_{SM}\right|\frac{V_2}{L}\,r\,\cos\theta\,\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\hat{x}\,|\alpha_{00}000\rangle\,,
\end{aligned}
$$

và

$$
\begin{aligned}
C_{2k-1}(\infty) &= 0\,, \\
C_{2k}(\infty) &= \frac{1}{2k\hbar\omega}\left(e^{i2k\omega\tau}-1\right)\frac{V_2}{L}\,\lambda_1 \\
&\quad\times\,\delta_{S1}\left[\frac{2}{3\sqrt{5}}\,\delta_{m0}\,\delta_{M0} - \frac{1}{\sqrt{15}}\,\delta_{m,1}\,\delta_{M,-1}\right. \\
&\quad\left. - \frac{1}{\sqrt{15}}\,\delta_{m,-1}\,\delta_{M1}\right],
\end{aligned}
$$

trong đó $k = 1, 2, \ldots, l = 2$, $\lambda_1 = \int_0^\infty r^3\,R_{(2k)2}R_{00}\,dr$.

PHẦN VII

CÁC HỆ NHIỀU HẠT

7001

Trong không gian một chiều, một hạt khối lượng m được hút về gốc tọa độ bằng một lực tuyến tính $-kx$. Phương trình Schrödinger của nó có các hàm riêng

$$\Psi_n(\xi) = H_n(\xi)\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right),$$

trong đó

$$\xi = \left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/4} x$$

và H_n là đa thức Hermite bậc n. Giá trị riêng là

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad \text{trong đó} \quad \omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}.$$

Xét hai hạt phân biệt và không tương tác nhau ($i = 1, 2$), khối lượng mỗi hạt là m, chúng đều được hút về gốc tọa độ bằng một lực $-kx_i$. Hãy tìm biểu thức của hàm riêng, giá trị riêng và độ suy biến cho hệ hai hạt bằng cách sử dụng một trong hai hệ tọa độ sau đây:

(a) tọa độ đơn hạt x_1 và x_2,

(b) tọa độ tương đối ($x = x_2 - x_1$) và tọa độ khối tâm ($X = \frac{x_1+x_2}{2}$).

(MIT)

Lời giải:

(a) Đối với hệ đơn hạt, Hamiltonian là

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 \\ &= -\frac{h^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} - \alpha^4 x^2\right) \end{aligned}$$

với $\alpha^4 = \frac{mk}{\hbar^2}$. Phương trình Schrödinger có thể viết là

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0,$$

trong đó

$$\xi = \alpha x, \qquad \lambda = \frac{2}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{k}}\,E\,.$$

Hàm riêng là

$$\psi_n(\xi) = H_n(\xi)\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right),$$

với giá trị riêng

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,,$$

trong đó

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}\,.$$

Sử dụng tọa độ đơn hạt x_1 và x_2, ta có thể viết Hamiltonian của hệ hai hạt là

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x_2^2 \\ &= H_1 + H_2\,. \end{aligned}$$

Hàm riêng năng lượng có thể thu được như hàm riêng chung của $\{H_1, H_2\}$, nghĩa là, $\psi(x_1, x_2) = \psi(x_1)\,\psi(x_2)$, năng lượng tương ứng là $E = E_1 + E_2$. Như vậy

$$\psi_{nm}(x_1, x_2) = H_n(\alpha x_1)H_m(\alpha x_2)\exp\left[-\frac{1}{2}\alpha^2(x_1^2 + x_2^2)\right],$$

$$E_{nm}^{(N)} = (n + m + 1)\,\hbar\omega = (N + 1)\hbar\omega\,,$$

trong đó

$$\alpha = \left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/4}, \qquad \omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}, \qquad N = n + m\,.$$

Độ suy biến của mức năng lượng $E_{nm}^{(N)}$ bằng số các cặp số nguyên không âm (n, m) thỏa mãn điều kiện $n + m = N$, nghĩa là,

$$f^{(N)} = N + 1\,.$$

(b) Sử dụng tọa độ tương đối $x = x_2 - x_1$ và khối tâm $X = \frac{x_1 + x_2}{2}$, ta sẽ viết Hamiltonian cho hệ dưới dạng

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}M\omega^2 X^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2\,,$$

trong đó $M = 2m$, $\mu = \frac{1}{2}m$, $\omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$. Cũng như (a) ta có

$$\psi_{nm}(X, x) = H_n(\alpha X)H_m(\beta x)\exp\left[-\frac{1}{2}(\alpha^2 X^2 + \beta^2 x^2)\right],$$

$$E_{nm}^{(N)} = (n + m + 1)\hbar\omega = (N + 1)\hbar\omega,$$

$$f^{(N)} = N + 1,$$

trong đó

$$\alpha = \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{1/2}, \qquad \beta = \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2}.$$

7002

Xét hai dao động tử điều hòa giống hệt nhau với độ cứng k. Thế tương tác được cho bằng $H = \varepsilon x_1 x_2$, trong đó x_1 và x_2 là biến số của dao động tử.

(a) Hãy tìm các mức năng lượng chính xác.

(b) Giả sử $\varepsilon \ll k$. Hãy tính các mức năng lượng bậc nhất đối với ε/k.

(Buffalo)

Lời giải:

(a) Hamiltonian của hệ là

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x_2^2 + \varepsilon x_1 x_2,$$

trong đó $\omega^2 = \frac{k}{m}$. Đặt

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(y_1 + y_2), \qquad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(y_1 - y_2),$$

ta có thể viết H như sau

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{1}{2}(m\omega^2 + \varepsilon)y_1^2 + \frac{1}{2}(m\omega^2 - \varepsilon)y_2^2.$$

Do đó, hệ có thể được coi như do hai dao động tử điều hòa có tọa độ y_1, y_2 tạo nên. Do đó, các mức năng lượng là

$$E_{n'n} = \left(n' + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\omega^2 + \frac{\varepsilon}{m}} + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\omega^2 - \frac{\varepsilon}{m}},$$

trong đó $n', n = 0, 1, 2. 3, \ldots$.

(b) Với $\varepsilon \ll k$, các mức năng lượng tính đến bậc nhất theo ε/k là

$$E_{n'n} = \left(n' + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \left(1 + \frac{\varepsilon}{k}\right)^{1/2} + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \left(1 - \frac{\varepsilon}{k}\right)^{1/2}$$
$$\approx (n' + n + 1)\hbar\omega + (n' - n)\hbar\omega\frac{\varepsilon}{2k}.$$

7003

(a) Hãy viết Hamiltonian và phương trình Schrödinger cho dao động tử điều hòa một chiều.

(b) Nếu $xe^{-\nu x^2}$ là một nghiệm, hãy tìm ν và sau đó hãy tính năng lượng E_1 và giá trị trung bình cho $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$, $\langle p^2\rangle$, $\langle px\rangle$.

(c) Hãy chỉ ra rằng đối với hai hạt bằng nhau trong hố thế của một dao động tử điều hòa một chiều duy nhất, trạng thái cơ bản có thể viết hoặc là $\phi_0(m, x_1) \times \phi_0(m, x_2)$ hoặc là

$$\phi_0\left(2m, \frac{x_1 + x_2}{2}\right) \phi_0\left(\frac{m}{2}, (x_1 - x_2)\right),$$

trong đó $\phi_0(m, x)$ là nghiệm trạng thái cơ bản cho một hạt duy nhất khối lượng m.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Hamiltonian cho dao động tử điều hòa một chiều là

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 .$$

Phương trình Schrödinger dừng là

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right) \psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) .$$

(b) Thế $\psi = xe^{-\nu x^2}$ vào phương trình Schrödinger, ta được

$$\begin{aligned}&\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(-2\nu)(3-2\nu x^2)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]xe^{-\nu x^2}\\&\quad=\left[\frac{3\hbar^2}{m}\nu+\left(\frac{1}{2}m\omega^2-\frac{2\hbar^2\nu^2}{m}\right)x^2\right]xe^{-\nu x^2}\\&\quad=E_1\,xe^{-\nu x^2}\,.\end{aligned}$$

Đồng nhất hệ số hai vế, ta thu được hệ

$$\begin{cases}\dfrac{1}{2}m\omega^2-\dfrac{2\hbar^2\nu^2}{m}=0\,,\\[2mm] E_1=\dfrac{3\hbar^2}{m}\nu\,,\end{cases}$$

suy ra

$$\begin{cases}\nu=\dfrac{m\omega}{2\hbar}\,,\\[2mm] E_1=\dfrac{3}{2}\hbar\omega\,.\end{cases}$$

Từ tính đối xứng ta biết $\langle x\rangle=0$. Định lý virial cho ta

$$\frac{1}{2m}\langle p^2\rangle=\frac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle=\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}\hbar\omega\,.$$

Như vậy

$$\langle p^2\rangle=\frac{3}{2}m\hbar\omega,\qquad\langle x^2\rangle=\frac{3}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\,.$$

Để tìm $\langle px\rangle$ trước tiên ta chuẩn hóa hàm sóng

$$A^2\int_{-\infty}^{\infty}x^2\,e^{-2\nu x^2}\,dx=1\,,$$

hay

$$A^2=4\nu\sqrt{\frac{2\nu}{\pi}}\,.$$

Sau đó xét

$$\begin{aligned}\langle px\rangle &= -\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty}\psi\frac{d}{dx}(x\psi)\,dx\\ &= \frac{\hbar}{i}A^2\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-\nu x^2}\frac{d}{dx}\left(x^2e^{-\nu x^2}\right)dx\\ &= \frac{\hbar}{i}A^2\int_{-\infty}^{\infty}2(x^2-\nu x^4)\,e^{-2\nu x^2}\,dx\\ &= -\frac{i\hbar}{2}.\end{aligned}$$

(c) Phương trình Schrödinger cho hệ hai hạt là

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)+\frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2+x_2^2)\right]\psi(x_1,x_2)=E\psi(x_1,x_2).$$

Giả sử $\psi(x_1,x_2)=\phi(x_1)\phi(x_2)$. Sau khi tách biến, ta được

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2+\frac{1}{2}m\omega^2x_i^2\right)\phi(x_i)=E_i\phi(x_i),\quad i=1,2,$$

với $E=E_1+E_2$.

Do đó, hệ có thể được coi như được tạo thành từ hai dao động tử điều hòa đồng nhất không có tương tác. Trạng thái cơ bản là

$$\psi_0(x_1,x_2)=\phi_0(m,x_1)\phi_0(m,x_2).$$

Mặt khác, đưa vào tọa độ Jacobi

$$R=\frac{1}{2}(x_1+x_2),\quad r=x_1-x_2,$$

phương trình Schrödinger trở thành

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{2}\nabla_R^2+2\nabla_r^2\right)+\frac{1}{2}m\omega^2\left(2R^2+\frac{1}{2}r^2\right)\right]\psi(R,r)=E\psi(R,r).$$

Bằng cách viết $\psi(R,r)=\phi(R)\varphi(r)$, phương trình trên được tách biến thành

$$\left(-\frac{\hbar^2}{4m}\nabla_R^2+m\omega^2R^2\right)\phi(R)=E_R\phi(R),$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m}\nabla_r^2+\frac{1}{4}m\omega^2r^2\right)\varphi(r)=E_r\varphi(r).$$

trong đó $E_R + E_r = E$, với E_R, E_r tương ứng mô tả chuyển động của khối tâm và chuyển động tương đối.

Như vậy, hàm sóng của trạng thái cơ bản có thể viết là

$$\begin{aligned}\psi_0(x_1, x_2) &= \phi_0(2m, R)\phi_0\left(\frac{m}{2}, r\right) \\ &= \phi_0\left(2m, \frac{x_1 + x_2}{2}\right)\phi_0\left(\frac{m}{2}, x_1 - x_2\right).\end{aligned}$$

7004

Xét hai hạt khối lượng $m_1 \neq m_2$ tương tác qua Hamiltonian

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2}m_1\omega^2 x_1^2 + \frac{1}{2}m_2\omega^2 x_2^2 + \frac{1}{2}K(x_1 - x_2)^2.$$

(a) Hãy tìm nghiệm chính xác.

(b) Hãy vẽ phác phổ trong giới hạn liên kết yếu $K \ll \mu\omega^2$, trong đó μ là khối lượng rút gọn.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Đặt

$$R = (m_1x_1 + m_2x_2)/(m_1 + m_2), \qquad r = x_1 - x_2.$$

Ta có

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx_1} &= \frac{\partial R}{\partial x_1}\frac{d}{dR} + \frac{\partial r}{\partial x_1}\frac{d}{dr} \\ &= \frac{m_1}{m_1 + m_2}\frac{d}{dR} + \frac{d}{dr},\end{aligned}$$

và do đó

$$\frac{d^2}{dx_1^2} = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\right)^2\frac{d^2}{dR^2} + 2\frac{m_1}{m_1 + m_2}\frac{d^2}{drdR} + \frac{d^2}{dr^2},$$

và tương tự

$$\frac{d^2}{dx_2^2} = \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\right)^2\frac{d^2}{dR^2} - 2\frac{m_2}{m_1 + m_2}\frac{d^2}{dRdr} + \frac{d^2}{dr^2}.$$

Ta cũng có

$$x_1^2 = R^2 + 2\frac{m_2}{m_1+m_2}Rr + \frac{m_2^2}{(m_1+m_2)^2}r^2 .$$

$$x_2^2 = R^2 - 2\frac{m_1}{m_1+m_2}Rr + \frac{m_1^2}{(m_1+m_2)^2}r^2 .$$

Do đó

$$\begin{aligned} H = & \frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\frac{d^2}{dR^2} - \frac{\hbar^2}{2}\frac{m_1+m_2}{m_1 m_2}\frac{d^2}{dr^2} \\ & + \frac{1}{2}(m_1+m_2)\omega^2 R^2 + \frac{1}{2}\frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}\omega^2 r^2 + \frac{1}{2}Kr^2 . \end{aligned}$$

Đặt

$$M = m_1 + m_2, \qquad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2} .$$

Phương trình chuyển động trở thành

$$\begin{aligned} & \left[\frac{-\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{2}M\omega^2R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\mu}{2}\left(1+\frac{K}{\mu\omega^2}\right)\omega^2 r^2\right]\psi(R,r) \\ & = E\psi(R,r) . \end{aligned}$$

Sau khi tách biến phương trình trên sẽ quy về hai phương trình dao động tử độc lập với năng lượng và hàm sóng là

$$E = E_{lm} = E_l + E_m = \left(l+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\sqrt{1+\frac{K}{\mu\omega^2}} ,$$

$$\begin{aligned} \psi_{lm}(R,r) = \psi_l(R)\psi_m(r) = N_l N_m \exp\left[-\frac{1}{2}\alpha_1^2 R^2\right] H_l(\alpha_1 R) \\ \times \exp\left[-\frac{1}{2}\alpha_2^2 r^2\right] H_m(\alpha_2 r) , \end{aligned}$$

trong đó

$$N_l = \left(\frac{\alpha_1}{\sqrt{\pi}2^l l!}\right)^{1/2}, \qquad \alpha_1 = \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{1/2} ,$$

$$N_m = \left(\frac{\alpha_2}{\sqrt{\pi}2^m m!}\right)^{1/2}, \qquad \alpha_2 = \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\left(1+\frac{K}{\mu\omega^2}\right)^{1/4} ,$$

và H_m là đa thức Hermite.

(b) Với $K \ll \mu\omega^2$, nếu ta có thể lấy

$$\left(1 + \frac{K}{\mu\omega^2}\right)^{1/2} \approx 1\,,$$

ta có

$$E_{lm} \approx (l + m + 1)\,\hbar\omega = (N + 1)\,\hbar\omega, \qquad N \equiv l + m = 0, 1, 2, \ldots .$$

Điều đó nghĩa là độ suy biến của mức năng lượng thứ N là $N + 1$:

$$\begin{array}{lllll} N \cdots & \cdots & & & \\ N = 3 & \underline{l = 3,\ m = 0}; & \underline{l = 2,\ m = 1}; & \underline{l = 1,\ m = 2}; & \underline{l = 0,\ m = 3}\,. \\ N = 2 & \underline{l = 2,\ m = 0}; & \underline{l = 1,\ m = 1}; & \underline{l = 0,\ m = 2}\,. & \\ N = 1 & \underline{l = 1,\ m = 0}; & \underline{l = 0,\ m = 1}\,. & & \\ N = 0 & \underline{l = m = 0}\,. & & & \end{array}$$

Nếu K không phải là quá nhỏ và nếu ta lấy

$$\sqrt{1 + \frac{K}{\mu\omega^2}} = 1 + \frac{K}{2\mu\omega^2} + \cdots$$

thì khi đó các mức năng lượng với cùng m sẽ được nâng lên một lượng bằng

$$\left(m + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\left(\frac{K}{2\mu\omega^2} + \cdots\right)\,,$$

và như vậy sự suy biến bị khử.

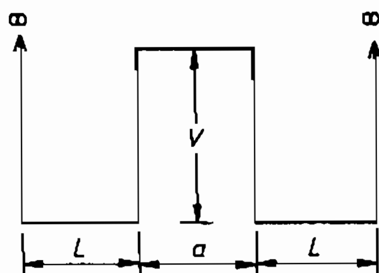
7005

Một thế có dạng như trên Hình 7.1, trong đó V là rất lớn nhưng hữu hạn.

(i) Một hạt ban đầu nằm ở một trong hai nửa hố thế, hãy tìm một công thức tính cỡ độ lớn tốc độ mà hạt xuyên ngầm sang nửa hố kia. Không cần tìm thừa số có độ lớn cỡ đơn vị.

(ii) Hãy vẽ hàm sóng cho những trạng thái thấp nhất.

(iii) Nếu có hai boson đồng nhất với một lực đẩy nhỏ giữa chúng được đặt vào trong hố thế, hãy viết hàm sóng gần đúng cho hai trạng thái



Hình 7.1

thấp nhất; xét hai trường hợp: hiệu ứng của lực giữa các hạt hoặc là nhỏ hơn và hoặc là lớn hơn nhiều hiệu ứng do thế V không phải là vô hạn. *(Berkeley)*

Lời giải:

(i) Kí hiệu trạng thái cơ bản là ψ_1 và trạng thái kích thích đầu tiên ψ_2. ψ_1 là đối xứng đối với trục đối xứng của hố thế, ψ_2 là phản đối xứng. Giả sử ban đầu hạt ở trong nửa hố bên trái và viết hàm sóng ban đầu dưới dạng

$$\Psi(x,0) = (\psi_1 + \psi_2)/\sqrt{2}\,.$$

(Ta có thể thấy, đây là một gần đúng tốt nếu đối chiếu với đồ thị được cho trong (ii)). Khi đó

$$\Psi(x,t) = [\psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}]/\sqrt{2}\,.$$

Vào thời điểm t_0 sao cho $e^{-iE_1 t_0/\hbar}/e^{-iE_2 t_0/\hbar} = -1$, ta có

$$\Psi(x,t_0) = C(\psi_1 - \psi_2)/\sqrt{2}, \quad |C|^2 = 1\,.$$

Vào thời điểm này, hạt nằm ở nửa bên kia của hố thế (nghĩa là với một xác suất lớn). Vì $-1 = e^{i\pi}$, điều này xảy ra vào thời điểm

$$t_0 = \frac{\pi\hbar}{E_2 - E_1} = \frac{\pi\hbar}{\Delta E}\,.$$

Với V rất lớn, và có thể coi là vô hạn ta có

$$E \approx \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2mL^2}\,.$$

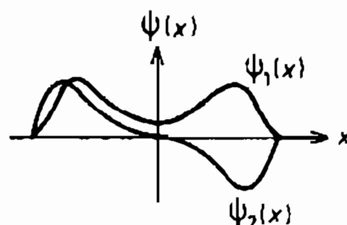
Như vậy

$$\Delta E \approx E_2 - E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(2^2 - 1) = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,.$$

Do đó, tốc độ chui hầm trên một đơn vị thời gian sẽ cỡ

$$\beta \sim \frac{1}{t_0} = \frac{3\pi\hbar}{2mL^2}.$$

(ii) Hàm sóng của hai trạng thái được vẽ trong Hình 7.2.



Hình 7.2

(iii) Nếu thế đẩy giữa các boson là nhỏ hơn nhiều so với V, hàm sóng của hai trạng thái thấp nhất sẽ gần đúng là

$$\Psi_I = \psi_1(1)\psi_1(2),$$

$$\Psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_2(1)\psi_1(2)\right].$$

Nếu thế đẩy là lớn hơn nhiều so với V, sự chuyển dời qua hàng rào thế trung tâm là rất nhỏ, và hàm sóng gần đúng là

$$\Psi_{I'} = \psi_1(1)\psi_1(2),$$

$$\Psi_{II'} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_2(1)\psi_1(2)\right].$$

7006

Xét một hệ được định nghĩa bằng phương trình giá trị riêng Schrödinger

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_1^2 + \nabla_2^2\right) + \frac{k}{2}\left|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\right|^2\right\}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).$$

(a) Hãy liệt kê tất cả các đối xứng của Hamiltonian nói trên.

(b) Hãy chỉ ra những ràng buộc của chuyển động.

(c) Hãy chỉ ra dạng của hàm sóng trạng thái cơ bản.

Bạn có thể giả sử rằng, hàm sóng trạng thái cơ bản của một dao động tử điều hòa một chiều có dạng Gauss.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Phương trình Schrödinger có đối xứng đối với phép tịnh tiến thời gian, nghịch đảo không gian, tịnh tiến toàn hệ, hoán vị $\mathbf{r}_1$ và $\mathbf{r}_2$, đồng thời đối xứng đối với phép biến đổi Galileo.

(b) Đặt $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$. Phương trình Schrödinger có thể viết dưới dạng

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{4m}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{m}\nabla_r^2 + \frac{k}{2}r^2\right\}\psi(\mathbf{R},\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{R},\mathbf{r}).$$

Phương trình này có thể tách thành hai, một cho chuyển động của hạt khối lượng $2m$ ở khối tâm và một cho chuyển động của một dao động tử điều hòa khối lượng $m/2$ tương đối so với hạt thứ hai. Chuyển động của khối tâm là chuyển động tự do, như vậy P_R^2, P_x, P_y, P_z, E_R, L_R^2, L_x, L_y, L_z tất cả đều là các tích phân chuyển động. Đối với chuyển động tương đối, E_r, L_r^2, L_z, đồng thời cả tính chẵn lẻ của hàm sóng cũng là các tích phân chuyển động.

(c) Hàm sóng trạng thái cơ bản có dạng $\psi(\mathbf{R},\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{R})\varphi(\mathbf{r})$. $\phi(\mathbf{r})$ là hàm sóng của dao động tử điều hòa với khối lượng $\frac{m}{2}$

$$\varphi(\mathbf{r}) \sim \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2\right)$$

với

$$\alpha^2 = \sqrt{\frac{mk}{2\hbar^2}}.$$

$\phi(\mathbf{R})$ là hàm sóng của một hạt tự do khối lượng $2m$

$$\phi(\mathbf{R}) \sim \exp(-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}/\hbar)$$

với

$$|\mathbf{p}| = \sqrt{4mE_R}, \qquad E_R = E - \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{2k}{m}}.$$

7007

Hai boson đồng nhất, mỗi hạt có khối lượng m, chuyển động trong thế dao

động tử điều hòa một chiều $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Nó cũng tương tác với nhau thông qua thế

$$V_{\text{int}}(x_1, x_2) = \alpha e^{-\beta(x_1 - x_2)^2},$$

trong đó β là một tham số dương. Hãy tính năng lượng trạng thái cơ bản ở gần đúng đầu tiên theo tham số cường độ tương tác α.

(Berkeley)

Lời giải:

Vì là boson hai hạt có thể cùng ở trong trạng thái cơ bản. Coi V_{int} như nhiễu loạn, hàm sóng không nhiễu loạn của hệ mô tả trạng thái cơ bản là

$$\psi_0(x_1, x_2) = \phi_0(x_1)\phi_0(x_2) = \frac{\alpha_0}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\alpha_0^2(x_1^2 + x_2^2)\right], \quad \alpha_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.$$

Năng lượng nhiễu loạn bậc nhất theo α là

$$\begin{aligned} \Delta E &= \iint_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x_1, x_2) V_{\text{int}}(x_1, x_2)\psi_0(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \frac{\alpha_0^2\alpha}{\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} \exp[-\alpha_0^2(x_1^2 + x_2^2) - \beta(x_1 - x_2)^2]\, dx_1 dx_2 \\ &= \frac{\alpha_0\alpha}{(\alpha_0^2 + 2\beta)^{1/2}}, \end{aligned}$$

trong đó tích phân có thể dễ dàng tính được bằng phép đổi biến

$$\frac{x_1 + x_2}{2} = y_1, \qquad \frac{x_1 - x_2}{2} = y_2.$$

Như vậy, năng lượng trạng thái cơ bản của hệ là

$$E = \hbar\omega + \frac{\alpha_0\alpha}{(\alpha_0^2 + 2\beta)^{1/2}} \quad \text{với} \quad \alpha_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}.$$

7008

Một hố thế vuông góc một chiều có độ sâu vô hạn và độ rộng 1 Å chứa ba electron. Hố thế được mô tả bằng hàm $V = 0$ cho $0 \le x \le 1$ Å và $V = +\infty$ đối với $x < 0$ và $x > 1$ Å. Với nhiệt độ $T = 0$ K, năng lượng trung bình của ba electron là $E = 12,4$ eV trong gần đúng bỏ qua tương tác Coulomb giữa các

electron. Cũng với gần đúng này và cho $T = 0$ K, năng lượng trung bình của bốn electron trong hố thế sẽ là bao nhiêu?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Đối với hố thế một chiều các mức năng lượng được cho bằng

$$E_n = E_1 n^2 ,$$

trong đó E_1 là năng lượng trạng thái cơ bản và $n = 1, 2, \ldots$. Nguyên lý loại trừ Pauli và nguyên lý năng lượng thấp nhất sẽ đòi hỏi hai trong ba electron ở mức năng lượng E_1 và electron thứ ba sẽ ở mức năng lượng E_2. Như vậy, $12,4 \times 3 = 2E_1 + 4E_1$, sẽ cho $E_1 = 6,2$ eV. Đối với trường hợp bốn electron, hai là trong E_1 còn hai là trong E_2, và năng lượng trung bình là

$$E = \frac{1}{4}(2E_1 + 2E_2) = \frac{5}{2} E_1 = 15,5 \text{ eV}.$$

(Chú ý: Giá trị đúng đắn của E_1 là

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{1}{2mc^2}\left(\frac{\pi\hbar c}{a}\right)^2 = \frac{1}{1,02 \times 10^6}\left(\frac{\pi \times 6,58 \times 10^{-16} \times 3 \times 10^{10}}{10^{-8}}\right)^2$$
$$= 37,7 \text{ eV})$$

7009

Xét hai electron chuyển động trong hố thế xuyên tâm, trong đó, chỉ có ba trạng thái đơn hạt ψ_1, ψ_2 và ψ_3.

(a) Hãy viết tất cả các hàm sóng $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ cho hệ hai electron.

(b) Nếu bây giờ các electron tương tác bằng với Hamiltonian $\delta H = V'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V'(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$, hãy chứng tỏ rằng, biểu thức sau đây cho yếu tố ma trận là đúng

$$\begin{aligned}\langle\psi_{13}|\delta H|\psi_{12}\rangle =& \langle\psi_3(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)|V'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)\rangle \\ &- \langle\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_3(\mathbf{r}_2)|V'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)\rangle .\end{aligned}$$

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Hàm sóng của hệ fermion là phản đối xứng đối với hoán vị hai hạt, cho

nên, các hàm sóng khả dĩ cho hệ là

$$\psi_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)\right),$$

$$\psi_{13} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_3(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_3(\mathbf{r}_1)\right),$$

$$\psi_{23} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_3(\mathbf{r}_2) - \psi_2(\mathbf{r}_2)\psi_3(\mathbf{r}_1)\right).$$

(b) Ta có thể viết

$$\begin{aligned}\langle\psi_{13}|\delta H|\psi_{12}\rangle = & \frac{1}{2}\langle\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_3(\mathbf{r}_2)|V'(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)|\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)\rangle \\ & - \frac{1}{2}\langle\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_3(\mathbf{r}_2)|V'(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)|\psi_2(\mathbf{r}_1)\,\psi_1(\mathbf{r}_2)\rangle \\ & - \frac{1}{2}\langle\psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_3(\mathbf{r}_1)|V'(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)|\psi_1(\mathbf{r}_1)\,\psi_2(\mathbf{r}_2)\rangle \\ & + \frac{1}{2}\langle\psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_3(\mathbf{r}_1)|V'(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)|\psi_2(\mathbf{r}_1)\,\psi_1(\mathbf{r}_2)\rangle.\end{aligned}$$

Bởi vì các hạt là đồng nhất, $\mathbf{r}_1$ và $\mathbf{r}_2$ có thể đổi chỗ trong từng số hạng. Làm việc đó và vì $V'(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = V'(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1)$, ta thu được một lần nữa cùng một biểu thức, điều này chứng tỏ nó đúng.

7010

Hai hạt fermion phi tương đối tính đồng nhất có khối lượng m, spin 1/2 được đặt trong hố thế một chiều vuông góc có độ rộng L và có tường V cao vô hạn. Hai fermion tương tác đẩy với thế $V(x_1 - x_2)$, có thể coi như một nhiễu loạn. Hãy xắp xếp ba trạng thái năng lượng thấp nhất theo trạng thái của từng hạt riêng lẻ và trạng thái spin của mỗi hạt. Hãy tính (bậc nhất của lý thuyết nhiễu loạn) năng lượng của trạng thái thấp thứ hai và thứ ba; hãy để kết quả của bạn dưới dạng tích phân. Bỏ qua hoàn toàn lực phụ thuộc vào spin.

(*Berkeley*)

Lời giải:

Cho thế không nhiễu loạn

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in [0,\ L], \\ \infty, & \text{các trường hợp còn lại}, \end{cases}$$

phần không gian của hàm sóng một hạt là

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{L}} \sin \dfrac{n\pi x}{L}, & x \in [0, L] \\ 0, & \text{các trường hợp còn lại}, \end{cases}$$

trong đó n là một số nguyên.

Hàm sóng spin của một hạt có dạng $\binom{a}{b}$.

Bởi vì ta không xét đến các lực phụ thuộc spin, hàm sóng của hai hạt có thể viết như tích của phần spin và phần không gian. Phần spin $\chi_J(M) \equiv \chi_{JM}$ được chọn như trạng thái riêng của toán tử $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$ và $S_z = s_{1z} + s_{2z}$, nghĩa là,

$$\mathbf{S}^2 \chi_{JM} = J(J+1)\,\chi_{JM}\,,$$

$$S_J \chi_{JM} = M \chi_{JM}\,.$$

$J = 0$ cho trạng thái spin đơn tuyến, nó là phản đối xứng đối với hoán vị hai hạt. $J = 1$ cho trạng thái tam tuyến, và nó là đối xứng đối với hoán vị hai hạt. Đối xứng hóa và phản đối xứng hóa hàm sóng không gian của hệ hai hạt, ta có

$$\psi^A_{nm}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) - \psi_n(x_2)\psi_m(x_1)\right],$$

$$\psi^s_{nm}(x_1, x_2) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) + \psi_n(x_2)\psi_m(x_1)\right], & n \neq m, \\ \psi_n(x_1)\psi_n(x_2), & n = m. \end{cases}$$

Năng lượng tương ứng là

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n^2 + m^2), \qquad n, m = 1, 2, \cdots.$$

Hàm sóng toàn phần, mà nó là phản đối xứng, có thể viết là

$$\psi^A_{nm}(x_1, x_2)\,\chi^s_{JM}\,,$$

$$\psi^s_{nm}(x_1, x_2)\,\chi^A_{JM}\,.$$

Ba trạng thái năng lượng thấp nhất sẽ là như sau.

(i) Trạng thái cơ bản, $n = m = 1$. Hàm sóng không gian là đối xứng, như vậy, hàm sóng spin phải là đơn tuyến

$$\psi_0 = \psi^s_{11}(x_1, x_2)\,\chi_{00}\,.$$

(ii) Trạng thái kích thích đầu tiên, $n = 1$, $m = 2$.

$$\psi_1 = \begin{cases} \psi_{12}^A(x_1, x_2)\, \chi_{1M}, & M = 0, \pm 1, \\ \psi_{12}^s(x_1, x_2)\, \chi_{00}. \end{cases}$$

Bội suy biến là 4.

(iii) Trạng thái kích thích thứ hai, $n = 2$, $m = 2$. Phần không gian của hàm sóng là đối xứng, phần spin là đơn tuyến

$$\psi_2 = \psi_{22}^s(x_1, x_2)\, \chi_{00},$$

và nó không suy biến. Do Hamiltonian nhiễu loạn là độc lập đối với spin, tính toán nhiễu loạn của các trạng thái kích thích đầu tiên có thể xử lý như trường hợp không suy biến. Năng lượng nhiễu loạn của các trạng thái năng lượng thấp nhất, thứ hai và thứ ba được cho bởi

$$\Delta E_1^A = \int dx_1 dx_2\, |\psi_{12}^A(x_1, x_2)|^2 V(x_1 - x_2),$$

$$\Delta E_1^s = \int dx_1 dx_2\, |\psi_{12}^s(x_1, x_2)|^2 V(x_1 - x_2),$$

$$\Delta E_2 = \int dx_1 dx_2\, |\psi_{22}^s(x_1, x_2)|^2 V(x_1 - x_2).$$

7011

Hộp thế một chiều độ rộng L chứa hai hạt không có spin, mỗi hạt khối lượng m. Tương tác giữa hai hạt được mô tả bằng thế năng $V(x_1, x_2) = a\delta(x_1 - x_2)$. Hãy tìm năng lượng của trạng thái cơ bản ở gần đúng bậc nhất theo a.

(Columbia)

Lời giải:

Bỏ qua thế δ, ta có

$$V(x_1, x_2) = \begin{cases} 0, & 0 \le x_1, x_2 \le L, \\ \infty, & \text{trong các trường hợp khác}, \end{cases}$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_2^2} + V(x_1, x_2).$$

Sử dụng kết quả cho một hố thế sâu vô hạn, ta có

$$\begin{aligned}\psi_{nl}(x_1, x_2) &= \psi_n(x_1)\psi_l(x_2)\\ &= \frac{2}{L}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x_1\right)\sin\left(\frac{l\pi}{L}x_2\right),\end{aligned}$$

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n^2 + l^2), \qquad n, l = 1, 2, \cdots .$$

Đối với trạng thái cơ bản, $n = l = 1$,

$$E_{11} = \hbar^2\pi^2/mL^2 .$$

Bây giờ xét thế dạng δ như một nhiễu loạn

$$\hat{H}' = a\delta(x_1 - x_2) .$$

Bổ chính cho năng lượng trạng thái cơ bản gây bởi nhiễu loạn là

$$\begin{aligned}\bar{H}' &= \langle 11|\hat{H}|11\rangle\\ &= \int_0^L\int_0^L a\delta(x_1 - x_2)\sin^2\left(\frac{\pi}{L}x_1\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{L}x_2\right)\left(\frac{2}{L}\right)^2 dx_1 dx_2\\ &= a\left(\frac{2}{L}\right)^2\int_0^L \sin^4\left(\frac{\pi}{L}x_1\right)dx_1 = \frac{3a}{2L},\end{aligned}$$

và năng lượng trạng thái cơ bản là

$$E'_{11} = E_{11} + \bar{H}' = \frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2} + \frac{3a}{2L} .$$

7012

Hai electron ở vị trí cố định trên trục z có (năng lượng) tương tác lưỡng cực từ là $E = A(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 - 3s_{1z}s_{2z})$, trong đó $\mathbf{s}_i = \frac{1}{2}\sigma_i$, σ_i là ma trận spin Pauli, A là hằng số.

(a) Biểu diễn E/A theo toán tử spin toàn phần $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$.

(b) Tính các giá trị riêng của E/A và độ suy biến D của chúng (trọng số thống kê). (*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Vì

$$\mathbf{s}^2 = \frac{1}{4}\sigma^2 = \frac{1}{4}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3}{4}, \qquad s_z^2 = \left(\frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{4},$$

ta có

$$\mathbf{S}^2 = (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2)^2 = \frac{3}{2} + 2\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2,$$

$$S_z^2 = (s_{1z} + s_{2z})^2 = \frac{1}{2} + 2s_{1z}s_{2z},$$

và do đó

$$E/A = (\mathbf{s}_1 \cdot s_2 - 3s_{1z}s_{2z}) = (\mathbf{S}^2 - 3S_z^2)/2.$$

(b) Đối với trạng thái riêng chung $|S, M\rangle$ của S và S_z, ta có

$$\frac{E}{A}|S, M\rangle = \frac{1}{2}[S(S+1) - 3M^2]\,|S, M\rangle.$$

Như vậy

$\|S, M\rangle$	E/A	$D(E/A)$
$\|0, 0\rangle$	0	1
$\|1, \pm 1\rangle$	$-\frac{1}{2}$	2
$\|1, 0\rangle$	1	1

Chú ý rằng, đối với những trạng thái với $M \neq 0$, các mức năng lượng là suy biến bội hai, nghĩa là, $D = 2$.

7013

(a) Một hệ gồm hai fermion có hàm sóng $\psi(1, 2)$. Điều kiện gì cần phải thỏa mãn nếu các hạt là đồng nhất?

(b) Bằng cách nào điều này kéo theo khẳng định cơ bản của nguyên lý loại trừ Pauli, đó là: không thể có hai electron trong một nguyên tử có cùng các số lượng tử?

(c) Trạng thái kích thích đầu tiên của Mg có cấu hình $(3s, 3p)$ cho những electron hóa trị. Trong giới hạn liên kết LS, giá trị nào của L và S là khả dĩ?

Dạng phần không gian của hàm sóng sẽ như thế nào nếu sử dụng hàm sóng đơn hạt $\psi_s(\mathbf{r})$ và $\phi_p(\mathbf{r})$? Trạng thái nào sẽ có năng lượng thấp nhất, và vì sao?

(Berkeley)

Lời giải:

(a) $\psi(1,2)$ phải thỏa mãn điều kiện phản đối xứng đối với hoán vị hai hạt

$$\hat{P}_{12}\psi(1,2) = \psi(2,1) = -\psi(1,2)\,.$$

(b) Trong một nguyên tử, nếu có hai electron có cùng các số lượng tử thì $\psi(1,2) = \psi(2,1)$. Điều kiện phản đối xứng trước đây kéo theo $\psi(1,2) = 0$, điều này kéo theo là, trạng thái như vậy không tồn tại.

(c) Cấu hình electron $(3s, 3p)$ tương ứng với

$$l_1 = 0, \quad l_2 = 1\,,$$

$$s_1 = s_2 = 1/2\,.$$

Như vậy,

$$L = 1, \quad S = 0, 1\,.$$

$$\psi_S^L(1,2) = \phi_S^L(1,2)\,\chi_S(1,2)\,,$$

trong đó

$$\begin{cases} \phi_0^1(1,2) & = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\phi_s(\mathbf{r}_1)\phi_p(\mathbf{r}_2) + \phi_s(\mathbf{r}_2)\phi_p(\mathbf{r}_1)) \\ & = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(1 + \hat{P}_{12})\phi_s(\mathbf{r}_1)\phi_p(\mathbf{r}_2)\,, \\ \phi_1^1(1,2) & = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(1 - \hat{P}_{12})\phi_s(\mathbf{r}_1)\phi_p(\mathbf{r}_2)\,. \end{cases}$$

Trạng thái năng lượng thấp nhất là $\Psi_1^1(1,2)$, nghĩa là trạng thái với $S = 1$. Bởi vì phần không gian của trạng thái $S = 1$ là phản đối xứng đối với hoán vị hai hạt $1 \leftrightarrow 2$, xác suất để hai electron tiến đến gần nhau là rất nhỏ, cho nên, năng lượng đẩy Coulomb là nhỏ, kéo theo trạng thái này có năng lượng là thấp nhất.

7014

Hai hạt, mỗi hạt có khối lượng M, bị giam trong một hố thế của dao động tử điều hòa một chiều $V = \frac{1}{2}kx^2$ và tương tác với nhau thông qua lực hút điều hòa $F_{12} = -K(x_1 - x_2)$. Bạn có thể coi K là rất nhỏ.

(a) Hãy xác định năng lượng của ba trạng thái thấp nhất của hệ.

(b) Nếu hạt là đồng nhất và không có spin, những trạng thái nào trong (a) là khả dĩ?

(c) Nếu hạt là đồng nhất và có spin 1/2, spin toàn phần của mỗi trạng thái tìm được trong (a) là bao nhiêu?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Hamiltonian của hệ là

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) + \frac{1}{2}k(x_1^2 + x_2^2) + \frac{K}{2}(x_1 - x_2)^2 .$$

Đặt $\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2)$, $\eta = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2)$ và viết $\hat{H}$ dưới dạng

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2}\right) + \frac{1}{2}k(\xi^2 + \eta^2) + K\eta^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2}\right) + \frac{1}{2}k\xi^2 + \frac{1}{2}(k + 2K)\eta^2 .\end{aligned}$$

Hệ có thể coi như được tạo thành từ hai dao động tử điều hòa độc lập với tần số góc ω_1 và ω_2 được cho bởi

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{k}{M}}, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{k + 2K}{M}} .$$

Như vậy, năng lượng toàn phần là

$$E_{nm} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1 + \left(m + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2 ,$$

và trạng thái riêng tương ứng là

$$|nm\rangle = \psi_{nm} = \varphi_n^{(k)}(\xi)\,\varphi_m^{(k+2K)}(\eta) ,$$

trong đó $n, m = 0, 1, 2, \cdots$, và $\varphi_n^{(k)}$ là trạng thái riêng thứ n của dao động tử điều hòa với độ cứng là k .

(a) Năng lượng của ba trạng thái thấp nhất của hệ là

$$E_{00} = \frac{1}{2}\hbar(\omega_1 + \omega_2) ,$$

$$E_{10} = \frac{1}{2}\hbar(\omega_1 + \omega_2) + \hbar\omega_1 ,$$

$$E_{01} = \frac{1}{2}\hbar(\omega_1 + \omega_2) + \hbar\omega_2 .$$

(b) Nếu hạt là đồng nhất và không có spin, hàm sóng phải đối xứng đối với phép hoán vị hai hạt. Như vậy, trạng thái $|00\rangle$, $|10\rangle$ là khả dĩ, và trạng thái $|01\rangle$ là không.

(c) Nếu các hạt là đồng nhất và có spin 1/2, hàm sóng toàn phần, bao gồm cả không gian và spin là phản đối xứng đối với phép hoán vị hai hạt. Vì hàm sóng spin cho spin toàn phần $S = 0$ là phản đối xứng và cho $S = 1$ là đối xứng, ta có

$$S = 0 \quad \text{đối với } |00\rangle\,,$$
$$S = 0 \quad \text{đối với } |10\rangle\,,$$
$$S = 1 \quad \text{đối với } |01\rangle\,.$$

7015

Một hố thế một chiều đặc biệt có các hàm riêng năng lượng một hạt cho trạng thái liên kết sau đây

$$\psi_a(x),\ \psi_b(x),\ \psi_c(x)\cdots, \quad \text{trong đó} \quad E_a < E_b < E_c\cdots.$$

Hai hạt không tương tác cùng có khối lượng M được đặt trong hố thế đó. Với mỗi trường hợp (a), (b), (c) được liệt kê dưới đây, hãy tìm:

Hai mức năng lượng toàn phần thấp nhất cho hệ hai hạt, bội suy biến của mỗi mức năng lượng đó, hàm sóng hai hạt khả dĩ liên quan đến mỗi mức năng lượng.

(Sử dụng ψ để biểu diễn phần hàm sóng không gian và $|S, m_s\rangle$ để diễn tả phần spin. S là spin toàn phần)

(a) Hai hạt khác nhau có spin 1/2.

(b) Hai hạt đồng nhất có spin 1/2.

(c) Hai hạt đồng nhất có spin 0.

(MIT)

Lời giải:

Vì mỗi hạt có khối lượng M, không tương tác lẫn nhau, nên phần không

gian của hàm sóng sẽ thỏa mãn hai phương trình Schrödinger tách rời nhau

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+V(x_1)\right]\ \psi_i(x_1)=E_i\psi_i(x_1)\,,$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+V(x_2)\right]\ \psi_j(x_2)=E_j\psi_j(x_2)\,.$$

$$(i,\ j=a,b,c\ldots)$$

Các phương trình cũng có thể kết hợp để cho

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+V(x_1)+V(x_2)\right]\ \psi_i(x_1)\,\psi_j(x_2)$$
$$=(E_i+E_j)\,\psi_i(x_1)\,\psi_j(x_2)\,.$$

Ta sẽ xét hai mức năng lượng thấp nhất (i) và (ii).

(a) Hai hạt phân biệt nhau có spin 1/2.

(i) Năng lượng toàn phần $= E_a + E_a$, suy biến bội $= 4$. Hàm sóng là

$$\begin{cases}\psi_a(x_1)\,\psi_a(x_2)\,|0,0\rangle\,,\\ \psi_a(x_1)\,\psi_a(x_2)\,|1,m\rangle\,. \quad (m=0,\pm1)\end{cases}$$

(ii) Năng lượng toàn phần $= E_a + E_b$, suy biến bội $= 8$. Hàm sóng là

$$\begin{cases}\psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\,|0,0\rangle\,,\\ \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\,|1,m\rangle\,,\end{cases}\qquad \begin{cases}\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)\,|0,0\rangle\,,\\ \psi_a(x_1)\psi_b(x_2)\,|1,m\rangle\,. \quad (m=0,\pm1)\end{cases}$$

(b) Hai hạt đồng nhất, có spin 1/2.

(i) Năng lượng toàn phần $= E_a + E_a$, suy biến bội $= 1$. Hàm sóng là $\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)\,|0,0\rangle$.

(ii) Năng lượng toàn phần $= E_a + E_b$, suy biến bội $= 4$. Hàm sóng là

$$\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)+\psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\right]|0,0\rangle\,,\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)-\psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\right]|1,m\rangle\,. \quad (m=0,\pm1)\end{cases}$$

(c) Hai hạt đồng nhất, có spin 0.

(i) Năng lượng toàn phần $= E_a + E_a$, suy biến bội $= 1$. Hàm sóng là $\psi_a(x_1)\,\psi_a(x_2)|0,0\rangle$.

(ii) Năng lượng toàn phần $= E_a + E_a$, suy biến bội $= 1$. Hàm sóng là

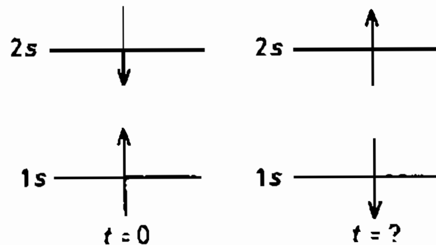
$$\frac{1}{\sqrt{2}}\,[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)|0,0\rangle\,.$$

7016

Hai electron chuyển động trong trường xuyên tâm. Xét tương tác tĩnh điện $e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ giữa hai electron như một nhiễu loạn.

(a) Hãy tìm những chuyển dịch năng lượng bậc nhất cho trạng thái (số hạng) của cấu hình $(1s)(2s)$ (Biểu diễn đáp số của bạn thông qua các đại lượng không nhiễu loạn và qua các yếu tố ma trận của tương tác $e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$).

(b) Thảo luận về tính đối xứng của hàm sóng hai hạt cho các trạng thái ở câu (a).



Hình 7.3

(c) Giả sử rằng, vào thời điểm $t = 0$, một electron được tìm thấy ở trạng thái không nhiễu loạn $1s$ với spin lên và electron khác trong trạng thái không nhiễu loạn $2s$ với spin xuống như đã vẽ trong Hình 7.3. Vào thời điểm t nào sự chiếm chỗ của electron được đảo ngược lại?

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Hàm sóng bậc không của hai electron có dạng

$$\phi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\,\chi_{00}(s_{1z}, s_{2z})\,,$$

$$\phi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\,\chi_{1M_s}(s_{1z}, s_{2z})\,,$$

trong đó

$$\phi_\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_{1s}(1)v_{2s}(2) + \varepsilon u_{1s}(2)v_{2s}(1)]\,, \quad \varepsilon = \pm 1\,,$$

là hàm sóng trực chuẩn đối xứng $(+)$ và phản đối xứng $(-)$, χ_0 và χ_1 chỉ trạng thái tương ứng đơn tuyến và tam tuyến. Kí hiệu $u_{1s}(1)v_{2s}(2)$ bằng $|1,2\rangle$ và $u_{1s}(2)\,v_{2s}(1)$ bằng $|2,1\rangle$, ta có thể viết lại hàm sóng dưới dạng

$$|\phi_\varepsilon\rangle = (|1,2\rangle + \varepsilon|2,1\rangle)/\sqrt{2}\,.$$

Do Hamiltonian nhiễu loạn không phụ thuộc vào spin, ta không cần xét đến χ. Như vậy,

$$\begin{aligned}\Delta E_\varepsilon &= \int d^3r_1 d^3r_2 \phi_\varepsilon^* \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\phi_\varepsilon \\ &= \frac{1}{2}(\langle 1,2| + \varepsilon\langle 2,1|)\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}(|1,2\rangle + \varepsilon|2,1\rangle) \\ &= \frac{1}{2}[\langle 1,2|A|1,2\rangle + \langle 2,1|A|2,1\rangle \\ &\quad + \varepsilon\langle 1,2|A|2,1\rangle + \varepsilon\langle 2,1|A|1,2\rangle] = K + \varepsilon J\,,\end{aligned}$$

trong đó $A = e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, $K = \langle 1,2|A|1,2\rangle = \langle 2,1|A|2,1\rangle$ là tích phân trực tiếp, $J = \langle 1,2|A|2,1\rangle = \langle 2,1|A|1,2\rangle$ là tích phân trao đổi.

(b) Trạng thái đơn tuyến χ_0 là phản đối xứng đối đối với hoán vị spin. Tam tuyến χ_1 là đối xứng đối với hoán vị spin. Tương tự, ϕ_+ là đối xứng đối với hoán vị $\mathbf{r}_1$ và $\mathbf{r}_2$, và ϕ_- là phản đối xứng đối với hoán vị đó. Như vậy, hàm sóng toàn phần lúc nào cũng phản đối xứng đối với phép hoán vị electron.

(c) Trạng thái ban đầu của hệ là

$$\begin{aligned}\psi(t=0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|1s2s\rangle\,|\uparrow\downarrow\rangle - |2s1s\rangle\,|\downarrow\uparrow\rangle] \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}[(|1,2\rangle + |2,1\rangle)(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \\ &\quad + (|1,2\rangle - |2,1\rangle)(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+\chi_{00} + \psi_-\chi_{10})\,,\end{aligned}$$

và do đó hàm sóng ở thời điểm t là

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+\chi_{00}e^{-iE_+t/\hbar} + \psi_-\chi_{10}e^{-iE_-t/\hbar})\,.$$

Khi $e^{-iE_- t/\hbar}/e^{-iE_+ t/\hbar} = -1$, hàm sóng trở thành

$$\psi(t_n) = e^{-iE_+ t_n/\hbar} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_+ \chi_{00} - \psi_- \chi_{10})$$
$$= e^{-E_+ t_n/\hbar} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} [|2,1\rangle| \uparrow\downarrow\rangle - |1,2\rangle | \downarrow\uparrow\rangle] ,$$

mà điều đó chỉ ra rằng ở thời điểm đó electron $1s$ có spin xuống và electron $2s$ có spin lên, nghĩa là, spin đã bị đảo chiều. Vì $-1 = e^{i(2n+1)\pi}$, $n = 0, 1, 2 \cdots$, điều này xảy ra tại thời điểm

$$t = (2n+1)\pi \cdot \frac{\hbar}{E_+ - E_-} = \frac{(2n+1)\pi\hbar}{2J} .$$

7017

(a) Hãy chứng tỏ rằng toán tử chẵn lẻ giao hoán với toán tử mômen góc quỹ đạo. Số lượng tử chẵn lẻ của hàm điều hòa cầu $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ là gì?

(b) Hãy chứng tỏ đối với một dao động tử điều hòa một chiều trong trạng thái $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ thì $\langle \Delta x^2 \rangle_n \langle \Delta p^2 \rangle_n = (n + \frac{1}{2})^2 \hbar^2$.

(c) Xét chuyển động quay của phân tử hydro H_2. Tìm những mức năng lượng quay của nó. Tính đồng nhất của hạt nhân có ảnh hưởng gì đến phổ năng lượng? Loại bức xạ chuyển dời gì sẽ xảy ra giữa các trạng thái đó? Nhớ rằng, proton cũng là fermion.

(d) Hãy chứng tỏ rằng $(\mathbf{n} \cdot \sigma)^2 = 1$, trong đó $\mathbf{n}$ là vectơ đơn vị theo một phương tùy ý và σ là ma trận spin Pauli.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Áp dụng toán tử chẵn lẻ $\hat{P}$ và toán tử mômen quỹ đạo

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

lên hàm sóng bất kì, ta có $f(\mathbf{r})$

$$\hat{P}\mathbf{L}f(\mathbf{r}) = \hat{P}(\mathbf{r} \times \mathbf{p})f(\mathbf{r}) = (-\mathbf{r}) \times (-\mathbf{p})f(-\mathbf{r})$$
$$= \mathbf{r} \times \mathbf{p}f(-\mathbf{r}) = \mathbf{L}\hat{P}f(\mathbf{r}) .$$

Như vậy, $\hat{P}$ và $\mathbf{L}$ giao hoán nhau, nghĩa là

$$[\hat{P}, \mathbf{L}] = 0\,.$$

Bởi vì

$$\hat{P}Y_{lm}(\theta, \phi) = Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi)\,,$$

số lượng tử chẵn lẻ của $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ là $(-1)^l$.

(b) Đối với một dao động tử điều hòa một chiều, ta có thể dùng biểu diễn Fock

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^+), \qquad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a^+ - a)\,,$$

trong đó a, a^+ lần lượt là toán tử hủy và sinh có tính chất

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle\,,$$
$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle\,.$$

Sử dụng các toán tử đó, ta có

$$\begin{aligned}\langle n|x|n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\langle n|a + a^+|n\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}\langle n|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle = 0\,,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle n|x^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|(a + a^+)(a + a^+)|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}(\sqrt{n}\langle n|a + a^+|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\langle n|a + a^+|n+1\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}[\sqrt{n(n-1)}\langle n|n-2\rangle + n\langle n|n\rangle \\ &\quad + (n+1)\langle n|n\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}\langle n|n+2\rangle] \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)\,,\end{aligned}$$

và tương tự

$$\langle n|p|n\rangle = 0\,,$$

$$\langle n|p^2|n\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)\,.$$

Bởi vì

$$\langle \Delta x^2 \rangle_n = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle_n = \langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)\,,$$

$$\langle \Delta p^2 \rangle_n = \langle p^2 \rangle_n - \langle p \rangle_n^2 = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)\,,$$

ta tìm được

$$\langle \Delta x^2 \rangle_n \cdot \langle \Delta p^2 \rangle_n = \hbar^2 \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 .$$

(c) Các mức năng lượng quay của phân tử hydro được cho bởi

$$E_r = \hbar^2 K(K+1)/2I_0\,,$$

trong đó $I_0 = MR_0^2$ là mômen quán tính của phân tử đối với trục quay, vuông góc với đường nối hai hạt nhân của phân tử, K là số lượng tử mômen xung lượng, $K = 0, 1, 2, \cdots$. Bởi vì spin của proton là $\hbar/2$, hàm sóng toàn phần của phân tử là phản đối xứng đối với phép hoán vị hai proton. Khi hai proton hoán vị nhau, hàm sóng đối với chuyển động khối tâm và hàm sóng đối với dao động của nguyên tử là không thay đổi; chỉ có hàm sóng đối với chuyển động quay là bị ảnh hưởng

$$Y_{KM_K}(\theta, \varphi) \to Y_{KM_K}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^K Y_{KM_K}(\theta, \varphi)\,.$$

Nếu K là chẵn, $(-1)^K Y_{KM_K}(\theta, \varphi) = Y_{KM_K}(\theta, \varphi)$ và hàm sóng spin χ_0 phải phản đối xứng, nghĩa là, χ_0 là hàm sóng spin của đơn tuyến; Nếu K là lẻ, $(-1)^K Y_{KM_K}(\theta, \varphi) = -Y_{KM_K}(\theta, \varphi)$ và hàm sóng spin χ_1 phải là đối xứng, nghĩa là, χ_1 là trạng thái spin tam tuyến. Phân tử hydro trong trường hợp trước được gọi là para - hydro, còn trong trường hợp sau nó được gọi là ortho - hydro. Không có sự chuyển đổi lẫn nhau giữa para và ortho - hydro. Sự chuyển dời có thể xảy ra giữa các mức năng lượng quay với $\Delta K = 2, 4, 6, \cdots$ trong nội bộ mỗi loại. Chuyển dời tứ cực điện cũng có thể xảy ra giữa các mức năng lượng ấy.

(d)

$$(\mathbf{n} \cdot \sigma)^2 = \left(\sum_i n_i \sigma_i\right)^2 = \sum_{ij} n_i n_j \sigma_i \sigma_j$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,i} n_i n_j \{\sigma_i, \sigma_j\} = \sum_{i,j} n_i n_j \delta_{ij} = \sum_i n_i n_i = 1\,.$$

trong đó i, j chỉ x, y, z, và $\{\sigma_i, \sigma_j\} \equiv \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}$.

7018

Hai hạt khối lượng m được đặt trong một hộp vuông góc có các cạnh $a > b > c$ trong trạng thái năng lượng thấp nhất của hệ tương thích với các điều kiện dưới đây. Các hạt tương tác với nhau theo thế $V = A\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. Sử dụng lý thuyết nhiễu loạn bậc nhất để tính năng lượng của hệ trong các điều kiện sau đây:

(a) Các hạt không đồng nhất.

(b) Các hạt đồng nhất có spin 0.

(c) Các hạt đồng nhất có spin 1/2 và spin cùng chiều.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Hệ không nhiễu loạn có thể được xem xét như tạo nên bởi hai hệ một hạt tách rời nhau và hàm sóng là tích của hai hàm sóng một hạt

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2)\,.$$

Như vậy, hàm sóng trạng thái năng lượng thấp nhất là

$$\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} \dfrac{8}{abc}\sin\dfrac{\pi x_1}{a}\sin\dfrac{\pi x_2}{a}\sin\dfrac{\pi y_1}{b}\sin\dfrac{\pi y_2}{b}\sin\dfrac{\pi z_1}{c}\sin\dfrac{\pi z_2}{c}, \\ \qquad \text{đối với } 0 < x_i < a, \quad 0 < y_i < b, \quad 0 < z_i < c, \quad (i = 1, 2) \\ 0, \qquad \text{những trường hợp còn lại}, \end{cases}$$

năng lượng tương ứng là

$$E_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{m}\left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}\right)\,.$$

Lý thuyết nhiễu loạn bậc nhất cho bổ chính năng lượng

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int \psi_0^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) A\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\,\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 \\ &= \int A|\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1)|^2 d^3r_1 = \int_0^c \int_0^b \int_0^a A\left(\frac{8}{abc}\right)^2 \\ &\quad \times \left(\sin\frac{\pi x_1}{a}\sin\frac{\pi y_1}{b}\sin\frac{\pi z_1}{c}\right)^4 dx_1 dy_1 dz_1 = \frac{27A}{8abc}\,. \end{aligned}$$

và do đó

$$E' = \frac{\hbar^2\pi^2}{m}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right)+\frac{27A}{8abc}.$$

(b) Đối với hệ các hạt spin 0, hàm sóng toàn phần phải đối xứng đối với phép hoán vị hai hạt. Do đó, trạng thái năng lượng thấp nhất là

$$\psi_s(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \psi_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2),$$

và nó cũng giống như câu (a). Năng lượng cho bậc nhất nhiễu loạn cũng là

$$E'_s = \frac{\hbar^2\pi^2}{m}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right)+\frac{27A}{8abc}.$$

(c) Đối với hệ hạt có spin 1/2, hàm sóng toàn phần phải phản đối xứng. Vì spin cùng chiều, hàm sóng spin là đối xứng và phần không gian của hàm sóng phải phản đối xứng. Vì $\frac{1}{a^2} < \frac{1}{b^2} < \frac{1}{c^2}$, trạng thái năng lượng thấp nhất là

$$\psi_A(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{211}(\mathbf{r}_1)\psi_{111}(\mathbf{r}_2) - \psi_{211}(\mathbf{r}_2)\psi_{111}(\mathbf{r}_1)],$$

trong đó $\psi_{111}(\mathbf{r})$ và $\psi_{211}(\mathbf{r})$ tương ứng là trạng thái một hạt cơ bản và kích thích đầu tiên. Năng lượng không nhiễu loạn là

$$E_{A0} = \frac{\hbar\pi^2}{m}\left(\frac{5}{2a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right).$$

Bậc nhất của lý thuyết nhiễu loạn cho

$$\Delta E = \int \psi_A^*(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)A\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\psi_A(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2 = 0.$$

Như vậy

$$E'_A = \frac{\hbar^2\pi^2}{m}\left(\frac{5}{2a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right).$$

7019

Phân tử hình nhẫn porphyrin có mặt trong chất diệp lục, huyết cầu, và nhiều hợp chất quan trọng khác. Một số khía cạnh vật lý của các tính chất

phân tử có thể được mô tả bằng cách coi nó như một đường tròn một chiều bán kính $r = 4$ Å, và có 18 electron bị buộc phải chuyển động trên đó.

(a) Hãy viết hàm riêng năng lượng một hạt của hệ, giả sử rằng các electron không tương tác với nhau.

(b) Có bao nhiêu electron nằm trong mỗi mức để phân tử ở trạng thái cơ bản.

(c) Trạng thái nào là trạng thái năng lượng kích thích thấp nhất của phân tử? Tính bước sóng bức xạ (bằng số) mà phân tử có thể hấp thụ được?

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Kí hiệu tọa độ góc của electron là θ. Phương trình Schrödinger đối với một electron

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\psi(\theta) = E\psi(\theta)$$

có nghiệm là

$$\psi(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik\theta} .$$

Tính đơn trị của $\psi(\theta)$ đòi hỏi, $\psi(\theta) = \psi(\theta + 2\pi)$, kéo theo $k = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots$. Các mức năng lượng được cho bởi

$$E = \frac{\hbar^2}{2mr^2}k^2 .$$

(b) Kí hiệu 0,1,2,... là thứ tự của các mức năng lượng $E_0, E_1, E_2, \ldots$. Theo nguyên lý loại trừ Pauli, trong mức E_0 có thể có hai electron với spin ngược chiều nhau, trong khi E_k với $k \neq 0$, lại suy biến bội hai tương ứng với $\pm|k|$, do đó nó có thể bị bốn electron chiếm chỗ. Như vậy, cấu hình electron của trạng thái cơ bản của hệ sẽ là

$$0^2 1^4 2^4 3^4 4^4 .$$

(c) Cấu hình electron của trạng thái kích thích đầu tiên là

$$0^2 1^4 2^4 3^4 4^3 5^1 .$$

Hiệu năng lượng giữa E_4 và E_5 là

$$\Delta E = E_5 - E_4 = \frac{\hbar^2}{2mr^2}(5^2 - 4^2) = \frac{9\hbar^2}{2mr^2}$$

và bước sóng bị hấp thụ tương ứng là

$$\lambda = \frac{ch}{\Delta E} = \frac{8\pi^2}{9}\left(\frac{mc}{h}\right)r^2 = \frac{8\pi^2}{9} \times \frac{4^2}{0,0242} = 5800\,\text{Å}\,,$$

trong đó $\frac{h}{mc} = 0,0242\,\text{Å}$ là bức sóng Compton của electron.

7020

Một số lớn N fermion không spin có khối lượng m được đặt trong một hố thế của dao động tử điều hòa, với một hàm thế đẩy dạng hàm δ giữa các cặp

$$V = \frac{k}{2}\sum_{i=1}^{N} x_i^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_{i\neq j}\delta(x_i - x_j), \qquad k, \lambda > 0\,.$$

(a) Dùng hàm riêng chuẩn hóa của dao động tử điều hòa, $\psi_n(x)$, hãy tìm hàm sóng chuẩn hóa và năng lượng cho ba mức năng lượng thấp nhất. Bội suy biến của các mức đó là bao nhiêu?

(b) Hãy tính giá trị trung bình của $\sum_{i=1}^{N} x_i^2$ cho mỗi một trong các trạng thái trên.

Bạn có thể tính cả phần (a) lẫn (b) với $\lambda = 0$.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Coi hàm thế δ như nhiễu loạn. Đối với một hệ gồm các fermion hàm sóng toàn phần phải phản đối xứng, hàm sóng trạng thái bậc không có thể viết dưới dạng định thức

$$\psi_{n_1\cdots n_N}(x_1\cdots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \cdots & \psi_{n_1}(x_N) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \cdots & \psi_{n_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_{n_N}(x_1) & \psi_{n_N}(x_2) & \cdots & \psi_{n_N}(x_N) \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P \delta_P P[\psi_{n_1}(x_1)\cdots\psi_{n_N}(x_N)]\,,$$

trong đó n_i là chỉ số trạng thái tính từ trạng thái cơ bản trở lên, P chỉ sự giao hoán của các x_i và $\delta_P = +1, -1$ đối với hoán vị chẵn và lẻ tương ứng. Tính

đến hàm δ các yếu tố ma trận của Hamiltonian nhiễu loạn là bằng không, như vậy, các mức năng lượng là

$$E_{(n_1,n_2,\ldots,n_N)} = \langle n_1 \cdots n_N | H | n_1 \cdots n_N \rangle = \hbar\omega \left(\frac{N}{2} + \sum_{i=1}^{N} n_i \right),$$

trong đó $\omega = \sqrt{k/m}$.

(i) Đối với trạng thái cơ bản: $n_1 \cdots n_N$ tương ứng bằng $0, 1, \ldots, N-1$, năng lượng là

$$E_{(0,\ldots,N-1)} = \hbar\omega \left[\frac{N}{2} + \frac{N(N-1)}{2} \right] = \frac{\hbar\omega}{2} N^2 ,$$

và hàm sóng là

$$\psi_{0,1,\ldots,N-1}(x_1 \cdots x_N) = \frac{1}{N!} \sum_P \delta_P P[\psi_0(x_1) \cdots \psi_{N-1}(x_N)] .$$

(ii) Đối với trạng thái kích thích: $n_1 \cdots n_N$ tương ứng bằng $0, 1, \ldots, N-2, N$, năng lượng là

$$E_{(0,\ldots,N-2,N)} = \frac{1}{2} \hbar\omega (N^2 + 2) ,$$

và hàm sóng là

$$\psi_{0,1,\ldots,N-2,N}(x_1 \cdots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \delta_P P[\psi_0(x_1) \cdots \psi_{N-2}(x_{N-1}) \psi_N(x_N)] .$$

(iii) Đối với trạng thái kích thích thứ hai: $n_1 \cdots n_N$ tương ứng hoặc là $0, 1, \ldots N-2, N+1$, hoặc là $0, 1, \ldots N-3, N-1, N$. Năng lượng là

$$E_{(0,\ldots N-2,N+1)} = E_{(0,1,\ldots N-3,N-1,N)} = \frac{\hbar\omega}{2} (N^2 + 4) ,$$

và hàm sóng tương ứng là

$$\psi_{0,\ldots,N-2,N+1}(x_1 \cdots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \delta_P P[\psi_0(x_1) \cdots \psi_{N-2}(x_{N-1}) \psi_{N+1}(x_N)] ,$$

$$\psi_{0,\dots N-3,N-1,N}(x_1\cdots x_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P \delta_P P[\psi_0(x_1)\cdots$$

$$\psi_{N-3}(x_{N-2})\psi_{N-1}(x_{N-1})\psi_N(x_N)]\,.$$

Có thể thấy rằng trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích đầu tiên là không suy biến, trong khi trạng thái kích thích thứ hai là suy biến bội hai.

(b) Đối với các trạng thái dừng,

$$2\langle T\rangle=\left\langle\sum_i x_i\partial_i V(x_1\cdots x_N)\right\rangle.$$

Vì

$$\left\langle\sum_k x_k\partial_k\sum_{i\neq j}\frac{\lambda}{2}\delta(x_i-x_j)\right\rangle=0\,,$$

$$\left\langle\sum_i x_i\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{k}{2}\sum_j x_j^2\right)\right\rangle=k\left\langle\sum_i x_i^2\right\rangle,$$

ta có

$$2\langle T\rangle=k\left\langle\sum_i^N x_i^2\right\rangle.$$

Theo định lý virial

$$\langle T\rangle=\langle V(x_1\cdots x_N)\rangle\,,$$

hay

$$E=2\langle T\rangle\,,$$

khi đó ta có

$$\left\langle\sum_{i=1}^N x_i^2\right\rangle=\frac{1}{m\omega^2}E\,.$$

Như vậy

$$\left\langle 0\left|\sum_{i=1}^N x_i^2\right|0\right\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}N^2\,,$$

$$\left\langle 1\left|\sum_{i=1}^N x_i^2\right|1\right\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}(N^2+2)\,,$$

$$\left\langle 2\left|\sum_{i=1}^N x_i^2\right|2\right\rangle=\left\langle 2'\left|\sum_{i=1}^N x_i^2\right|2'\right\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}(N^2+4)\,,$$

trong đó $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle$, và $|2'\rangle$ tương ứng là trạng thái cơ bản, trạng thái kích thích thứ nhất và thứ hai.

7021

Tính hiệu năng lượng theo eV giữa các mức năng lượng quay thấp nhất của phân tử HD? Khoảng cách H,D (D là đơteron) là 0,75 Å.

(*Berkeley*)

Lời giải:

Các mức năng lượng quay được cho bằng

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) .$$

Như vậy, hai mức thấp nhất,

$$\Delta E_{10} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)\bigg|_{J=1} - \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)\bigg|_{J=0} = \frac{\hbar^2}{I} .$$

Bởi vì khối lượng m_D của đơteron cỡ hai lần khối lượng m_p của hạt nhân hydro, ta có

$$I = \mu r^2 = \frac{2m_p \cdot m_p}{2m_p + m_p} r^2 = \frac{2}{3} m_p r^2 ,$$

và do đó

$$\Delta E_{10} = \frac{\hbar^2}{\frac{2}{3} m_P r^2} = \frac{3}{2} \frac{(\hbar c)^2}{m_p c^2} \frac{1}{r^2} = \frac{1,5}{938 \times 10^6}$$

$$\times \left(\frac{6,582 \times 10^{-16} \times 3 \times 10^{10}}{0,75 \times 10^{-8}} \right)^2 = 1,11 \times 10^{-2}\,\mathrm{eV} .$$

7022

Cho một phân tử (gồm hai hạt nhân cùng loại) N_2^{14}. Biết rằng hạt nhân của nitơ có spin $I = 1$ hãy chứng tỏ rằng tỉ số cường độ của các vạch liền kề trong phổ năng lượng quay của phân tử này là 2:1. (*Chicago*)

Lời giải:

Trong gần đúng đoạn nhiệt, hàm sóng của phân tử N_2 (có khối tâm đứng yên), có thể diễn tả bằng tích của hàm sóng electron ψ_e, hàm sóng

spin hạt nhân ψ_s, hàm sóng dao động ψ_0, và hàm sóng quay ψ_I; nghĩa là, $\psi = \psi_e\psi_s\psi_0\psi_I$. Đối với phổ quay phân tử, hàm sóng của các trạng thái năng lượng sẽ gồm các chuyển dời có cùng ψ_e, ψ_0, nhưng khác ψ_s, ψ_I. Khi giao hoán các hạt nhân nitơ, ta có $\psi_e\psi_0 \to \psi_e\psi_0$ hoặc $-\psi_e\psi_0$.

Hạt nhân của N là một boson vì spin của nó bằng 1, cho nên, spin hạt nhân toàn phần của phân tử N_2 chỉ có thể là 0, 1 hoặc 2, làm cho nó cũng là boson. Tác động toán tử $\hat{P}$ lên các hạt nhân N ta có

$$\hat{P}\psi_s = \begin{cases} +\psi_s & \text{đối với } S = 0, 2, \\ -\psi_s & \text{đối với } S = 1, \end{cases} \qquad \hat{P}\psi_I = \begin{cases} \psi_I & \text{đối với } I = \text{chẵn}, \\ -\psi_I & \text{đối với } I = \text{lẻ}. \end{cases}$$

Vì N_2 thỏa mãn thống kê Bose - Einstein, nên hàm sóng toàn phần không thay đổi đối với hoán vị hai hạt nhân. Như vậy, các mức năng lượng quay cạnh nhau với $\Delta I = 1$, một mức phải có $S = 0$ hoặc 2, mức còn lại $S = 1$, và tỉ số của các bậc suy biến của chúng là $[2 \times 2 + 1 + 2 \times 0 + 1] : (2 \times 1 + 1) = 2 : 1$.

Đối với phổ của phép quay phân tử, quy tắc chuyển dời là $\Delta J = 2$. Vì S thường không đổi đối với chuyển dời quang học, hai vạch cạnh nhau được tạo nên từ chuyển dời từ I = chẵn đến chẵn và I = lẻ đến lẻ. Bởi vì hiệu năng lượng giữa hai mức năng lượng cạnh nhau là rất nhỏ so với kT ở nhiệt độ phòng, ta có thể bỏ qua hiệu ứng của mọi phân bố nhiệt. Như vậy, tỉ số giữa các cường độ của những vạch cạnh nhau sẽ bằng tỉ số của bội suy biến của I = mức năng lượng quay chẵn và mức năng lượng quay I = lẻ, mà tỉ số này là 2:1.

7023

(a) Giả sử hai proton của phân tử H_2^+ được cố định ở khoảng cách thông thường của chúng cỡ 1,06 Å, hãy vẽ thế năng của electron dọc theo trục nối hai proton.

(b) Hãy phác họa hàm sóng của electron đối với hai trạng thái thấp nhất, bằng cách chỉ ra đại khái xem chúng có quan hệ gì với hàm sóng của nguyên tử loại hydro. Hàm sóng tương ứng với trạng thái cơ bản của H_2^+ là như thế nào, vì sao?

(c) Điều gì sẽ xảy ra đối với hai mức năng lượng thấp nhất của H_2^+ trong giới hạn mà các proton được tách ra xa nhau? (*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Vì proton được cố định, thế năng của hệ chính là của electron, bỏ đi

phần tương tác Coulomb giữa các hạt nhân $\frac{e^2}{R}$. Như vậy

$$V = -\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2|},$$

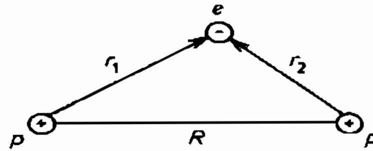
trong đó $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ được chỉ ra trong Hình 7.4. Khi electron nằm trên đường nối hai proton, thế năng là

$$V = -\frac{e^2}{|x|} - \frac{e^2}{|R - x|},$$

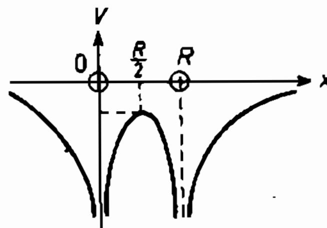
trong đó x là khoảng cách tính từ proton nằm bên trái. V được vẽ trên Hình 7.5 như là hàm đối với x. Hàm sóng phải là đối xứng hoặc phản đối xứng đối với phép hoán vị proton. Như vậy, hàm sóng của hai trạng thái thấp nhất là

$$\psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi(\mathbf{r}_1) \pm \phi(\mathbf{r}_2)],$$

trong đó $\phi(\mathbf{r})$ có dạng của hàm sóng trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro:



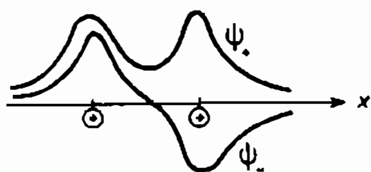
Hình 7.4



Hình 7.5

$$\phi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\lambda}{a}\right)^{3/2} e^{-\lambda r/a}$$

trong đó a là bán kính Bohr và λ là một hằng số. Dạng của hai hàm sóng dọc theo trục x được vẽ trong Hình 7.6. Ta có thể nhìn thấy rằng, xác suất để



Hình 7.6

electron nằm gần hai hạt nhân là lớn hơn đối với ψ_+. Như vậy ψ_+ tương ứng với một thế V thấp hơn và do đó nó là hàm sóng của trạng thái cơ bản. Việc $E_+ < E_-$ ta cũng có thể thấy từ

$$\begin{aligned} E_\pm &= \langle \psi_\pm | H | \psi_\pm \rangle \\ &= \langle \phi(\mathbf{r}_1) | H | \phi(\mathbf{r}_1) \rangle \pm \langle \phi(\mathbf{r}_1) | H | \phi(\mathbf{r}_2) \rangle , \end{aligned}$$

bởi vì

$$\langle \phi(\mathbf{r}_1) | H | \phi(\mathbf{r}_1) \rangle = \langle \phi(\mathbf{r}_2) | H | \phi(\mathbf{r}_2) \rangle ,$$

$$\langle \phi(\mathbf{r}_1) | H | \phi(\mathbf{r}_2) \rangle = \langle \phi(\mathbf{r}_2) | H | \phi(\mathbf{r}_1) \rangle .$$

và tất cả các tích phân đều âm.

(c) Vì các proton được tách ra xa nhau, việc chồng chất hai trạng thái $\phi(\mathbf{r}_1)$ và $\phi(\mathbf{r}_2)$ trở nên ngày càng ít, và như vậy $\langle \phi(\mathbf{r}_1) | H | \phi(\mathbf{r}_2) \rangle$ và $\langle \phi(\mathbf{r}_2) | H | \phi(\mathbf{r}_1) \rangle \to 0$. Nói một cách khác, hai mức năng lượng thấp nhất sẽ tiến đến bằng nhau, giống như năng lượng trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro.

7024

Hãy viết phương trình Schrödinger cho nguyên tử hêli, coi hạt nhân như một điện tích điểm nặng vô hạn.

(Berkeley)

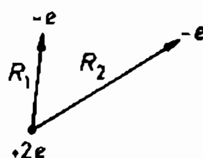
Lời giải:

Bằng cách coi hạt nhân như một hạt điểm nặng vô hạn, chuyển động của nó có thể bỏ qua, cũng như tương tác giữa các nucleon bên trong hạt nhân và sự phân bố điện tích hạt nhân

Phương trình Schrödinger khi đó sẽ là

$$\left(\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{R_1} - \frac{2e^2}{R_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|}\right)\psi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = E\psi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2),$$

trong đó $\mathbf{R}_1$, $\mathbf{R}_2$ được vẽ trên Hình 7.7.



Hình 7.7

Trong vế trái của phương trình trên, số hạng đầu tiên và thứ hai là động năng của các electron, số hạng thứ ba và thứ tư tương ứng với thế hút giữa hạt nhân và các electron, và số hạng cuối cùng là thế đẩy giữa hai electron.

7025

Cấu hình electron kích thích $(1s)^1(2s)^1$ của nguyên tử hêli có thể tồn tại như một đơn tuyến hoặc một tam tuyến. Hãy cho biết trạng thái nào có năng lượng thấp nhất và giải thích vì sao. Hãy cho một biểu thức diễn tả năng lượng phân cách giữa các trạng thái đơn tuyến và tam tuyến theo hàm sóng một hạt $\psi_{1s}(\mathbf{r})$ và $\psi_{2s}(\mathbf{r})$.

(*MIT*)

Lời giải:

Electron là fermion, hàm sóng toàn phần của hệ electron phải phản đối xứng đối với phép hoán vị của hai electron. Vì trạng thái tam tuyến spin của nguyên tử hêli là đối xứng, phần hàm sóng không gian của nó phải phản đối xứng. Trong trạng thái này các electron có spin song song, cho nên, xác suất để chúng gần nhau là rất nhỏ (nguyên lý Pauli), và hệ quả là, năng lượng đẩy nhau, vốn là dương, sẽ rất nhỏ. Ngược lại, với trạng thái đơn tuyến, tình trạng là ngược lại, nghĩa là xác suất để hai electron ở gần nhau là rất lớn và do đó, năng lượng đẩy cũng như vậy. Từ đó suy ra, trạng thái tam tuyến có năng lượng thấp hơn.

Coi tương tác giữa electron như nhiễu loạn. Hamiltonian nhiễu loạn là

$$H' = \frac{e^2}{r_{12}},$$

trong đó $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Đối với trạng thái đơn tuyến, sử dụng hàm sóng một hạt ψ_{1s}, ψ_{2s}, ta có

$$^1\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{2s}(\mathbf{r}_2) + \psi_{1s}(\mathbf{r}_2)\psi_{2s}(\mathbf{r}_1)]\chi_{00} ,$$

và đối với trạng thái tam tuyến

$$^3\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{2s}(\mathbf{r}_2) - \psi_{1s}(\mathbf{r}_2)\psi_{2s}(\mathbf{r}_1)]\chi_{1m}$$

với $m = 1, 0, -1$. Năng lượng phân cách giữa hai trạng thái là

$$\Delta E = \langle ^1\psi|H'|^1\psi\rangle - \langle ^3\psi|H'|^3\psi\rangle .$$

Với $\psi_{ns}^* = \psi_{ns}$, ta có

$$\Delta E = 2\int \frac{e^2}{r_{12}}[\psi_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{2s}(\mathbf{r}_1)\psi_{1s}(\mathbf{r}_2)\psi_{2s}(\mathbf{r}_2)]d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 .$$

7026

(a) Giả sử bạn giải phương trình Schrödinger cho nguyên tử hêli ion hóa một lần và tìm được hệ hàm riêng $\phi_N(\mathbf{r})$.

(1) Hàm riêng $\phi_N(\mathbf{r})$ so với hàm sóng của nguyên tử hydro sẽ như thế nào?

(2) Nếu kể cả phần spin σ^+ (hoặc σ^-) cho spin lên (hoặc spin xuống), khi đó sẽ kết hợp các ϕ và σ như thế nào để được một hàm riêng có spin xác định?

(b) Bây giờ ta xét nguyên tử hêli có hai electron nhưng bỏ qua tương tác điện từ giữa chúng.

(1) Hãy viết một hàm sóng hai electron đặc trưng theo ϕ và σ, với spin xác định. Bạn đừng chọn trạng thái cơ bản.

(2) Spin toàn phần trong ví dụ của bạn là bao nhiêu?

(3) Chứng tỏ rằng ví dụ của bạn là tương thích với nguyên lý loại trừ Pauli.

(4) Chứng tỏ rằng ví dụ của bạn là phản đối xứng đối với phép hoán vị electron.

(Buffalo)

Lời giải:

(a) (1) Phương trình Schrödinger cho nguyên tử He ion hóa một lần cũng giống như nguyên tử hydro với $e^2 \to Ze^2$, trong đó Ze là điện tích của hạt nhân He. Do đó, hàm sóng đối với ion kiểu nguyên tử hydro cũng giống như hàm sóng của nguyên tử hydro với bán kính Bohr được thay bằng

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \to a = \frac{\hbar^2}{\mu Z e^2}.$$

μ là khối lượng rút gọn của hệ. Đối với hêli $Z = 2$.

(2) Vì ϕ_N và $\sigma^\pm$ thuộc không gian khác nhau ta có thể đơn giản nhân chúng với nhau để tạo nên một hàm riêng có spin xác định.

(b) (1), (2) Một nguyên tử He, do chứa hai electron, nó có thể diễn tả bằng hàm sóng

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_N(1)\phi_N(2)[\sigma^+(1)\sigma^-(2) - \sigma^-(1)\sigma^+(2)]$$

nếu spin toàn phần bằng 0, và bằng hàm sóng

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_{N1}(1)\phi_{N2}(2) - \phi_{N2}(1)\phi_{N1}(2)]\sigma^+(1)\sigma^+(2)$$

nếu spin toàn phần bằng 1.

(3) Nếu $\sigma^+ = \sigma^-$, $\phi_{N1} = \phi_{N2}$, hàm sóng sẽ bằng không, phù hợp với nguyên lý loại trừ Pauli.

(4) Kí hiệu hàm sóng bằng $\psi(1,2)$. Hoán vị hạt 1 với hạt 2, ta có

$$\psi(2,1) = -\psi(1,2).$$

7027

Bỏ qua spin của electron, Hamiltonian đối với hai electron của nguyên tử hêli, có vị trí đối với của hạt nhân là $\mathbf{r}_i$ $(i = 1, 2)$, có thể viết dưới dạng

$$H = \sum_{i=1}^{2}\left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{2e^2}{|\mathbf{r}_i|}\right) + V, \qquad V = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

(a) Hãy chứng tỏ rằng, có 8 hàm sóng quỹ đạo, là hàm riêng của H − V với một electron ở trạng thái cơ bản kiểu nguyên tử hydro còn electron khác nằm trong trạng thái kích thích đầu tiên.

(b) Sử dụng những lập luận về đối xứng, hãy chỉ ra rằng, tất cả các yếu tố ma trận của V có thể biểu diễn qua bốn trong số 8 trạng thái đó. (Gợi ý: Sẽ có ích nếu sử dụng tổ hợp tuyến tính của hàm cầu điều hòa $l = 1$ tỉ lệ với

$$\frac{x}{|\mathbf{r}|}, \frac{y}{|\mathbf{r}|} \text{ và } \frac{z}{|\mathbf{r}|}.]$$

(c) Hãy chứng tỏ rằng nguyên lý biến phân dẫn đến phương trình định thức cho năng lượng của 8 trạng thái kích thích, nếu một tổ hợp tuyến tính của 8 hàm riêng của H − V được sử dụng như một hàm thử. Biểu diễn sự tách mức của năng lượng qua các yếu tố ma trận độc lập của V.

(d) Thảo luận về độ suy biến của các mức năng lượng gây ra bởi nguyên lý Pauli.

(*Buffalo*)

Lời giải:

Coi V như nhiễu loạn, hàm sóng bậc không là tích của hai hàm riêng $|n, l, m\rangle$ của nguyên tử loại hydro. Như vậy, 8 hàm riêng của $H_0 = \text{H} - \text{V}$ với một electron ở trạng thái cơ bản hydro có thể viết là

$$|lm\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|(100)_1(2lm)_2\rangle \pm |(2lm)_1(100)_2\rangle]$$

với $l = 0, 1, m = -l, \ldots l$, trong đó chỉ số dưới 1 và 2 nói về hai electron. Năng lượng tương ứng là

$$E_b = E_1 + E_2 = -\frac{\mu(2e^2)^2}{2\hbar^2}\left(1 + \frac{1}{2^2}\right) = -\frac{5\mu e^4}{2\hbar^2}.$$

Khi tính đến nhiễu loạn, ta sẽ tính các yếu tố ma trận

$$\langle l'm' + |V|lm\pm\rangle.$$

Vì V là bất biến quay và đối xứng đối với hai electron và $|lm\pm\rangle$ là trạng thái

riêng của phép quay không gian, ta có

$$\begin{aligned}
&\langle (100)_1(2l'm')_2|V|(100)_1(2lm)_2\rangle \\
&\quad = \langle (2l'm')_1(100)_2|V|(2lm)_1(100)_2\rangle \\
&\quad = \delta_{ll'}\delta_{mm'}A_l\,. \\
&\langle (100)_1(2l'm')_2|V|(2lm)_1(100)_2\rangle \\
&\quad = \langle (2l'm')_1(100)_2|V|(100)_1(2lm)_2\rangle \\
&\quad = \delta_{ll'}\delta_{mm'}B_l\,.
\end{aligned}$$

và do đó

$$\begin{aligned}
\langle l'm'+|V|lm+\rangle &= \delta_{ll'}\delta_{mm'}(A_l+B_l)\,,\\
\langle l'm'+|V|lm-\rangle &= 0\,.\\
\langle l'm'-|V|lm+\rangle &= 0\,.\\
\langle l'm'-|V|lm-\rangle &= \delta_{ll'}\delta_{mm'}(A_l-B_l)\,.
\end{aligned}$$

Do hàm sóng được tạo nên bằng cách tính đến đối xứng đối với hoán vị hai electron, ma trận nhiễu loạn có dạng đường chéo, từ đó dẫn đến bốn mức năng lượng gián đoạn sau đây:

Những mức đầu tiên $|1m+\rangle$ có năng lượng $E_b + A_1 + B_1$, những mức thứ hai $|1m-\rangle$ có năng lượng $E_b + A_1 - B_1$, mức thứ ba $|00+\rangle$ có năng lượng $E_b + A_0 + B_0$, và mức thứ tư $|00-\rangle$ có năng lượng $E_b + A_0 - B_0$. Chú ý rằng, các mức $|1m+\rangle$ và $|1m-\rangle$ mỗi mức suy biến bội ba ($m = \pm 1, 0$).

Theo nguyên lý Pauli, ta cũng phải xét hàm sóng spin. Bỏ qua tương tác spin quỹ đạo, hàm sóng spin toàn phần là χ_0, phản đối xứng, là một đơn tuyến; χ_{1s_z}, đối xứng và là một tam tuyến.

Vì hàm sóng toàn phần của electron là phản đối xứng đối với hoán vị hai electron, chúng ta phải lấy tổ hợp sau đây,

$$\begin{aligned}
&|lm+\rangle\chi_0\,,\\
&|lm-\rangle\chi_{1s_z}\,.
\end{aligned}$$

Do đó, tính suy biến của các mức năng lượng là

$$E_b + A_0 - B_0: \quad 1 \times 3 = 3$$

$$E_b + A_0 + B_0: \quad 1 \times 1 = 1$$

$$E_b + A_1 - B_1: \quad 3 \times 3 = 9$$

$$E_b + A_1 + B_1: \quad 3 \times 1 = 3.$$

7028

Hãy mô tả hàm sóng gần đúng và các mức năng lượng của tập hợp thấp nhất các trạng thái P ($L = 1$) của nguyên tử hêli trung hòa, bằng cách sử dụng cơ sở xuất phát là các hàm sóng đã biết của nguyên tử hydro với hạt nhân có điện tích bằng Ze:

$$\psi_{1s} = \pi^{-1/2} a^{-3/2} e^{-r/a}, \ a = a_0/Z,$$

$$\psi_{2p,m_l=0} = (32\pi)^{1/2} a^{-5/2} r e^{-r/2a} \cos\theta, \quad \text{v.v.}$$

(a) Có tất cả 12 trạng thái (2 thành phần spin × 2 thành phần spin × 3 thành phần quỹ đạo), được phân loại theo sơ đồ liên kết Russell - Saunder, bằng cách cho tất cả số lượng tử thích hợp. Chứng tỏ rằng các trạng thái đó là thực sự phản đối xứng.

(b) Hãy ước lượng giá trị của Z (gần bằng một số nguyên) được dùng cho từng hàm sóng quỹ đạo. Năng lượng của trạng thái cơ bản trước đây bằng bao nhiêu? Quá trình toán học nào có thể dùng để tính toán giá trị tối ưu của Z?

(c) Hãy viết tích phân cho khoảng phân cách hai tập con của 12 trạng thái do lực đẩy Coulomb giữa hai electron gây nên. Những trạng thái nào có năng lượng thấp nhất?

(d) Tìm xem một trong số các trạng thái P, nếu có, có thể rã thành trạng thái nguyên tử cơ bản bằng cách phát đi một photon.

(e) Tồn tại hay không một trạng thái kích thích nào đó với $L = 1$ có thể rã thành một trong số các trạng thái P vừa được bàn đến trên đây bằng cách phát đi một photon nhờ tương tác lưỡng cực điện? Nếu có, hãy cho một ví dụ trong số những trạng thái như thế bằng sơ đồ thông dụng của các kí hiệu quang phổ.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Bởi vì $\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$, $L_z = l_{1z} + l_{2z}$, $L = 1$ nghĩa là $l_1, l_2 = 0, 1$ hoặc 1,0, cho nên, một electron ở trạng thái $1s$, electron còn lại ở trường hợp $2p$. Để tiện lợi, ta sẽ dùng kí hiệu bra và ket để diễn tả các trạng thái. Hàm sóng không gian đối xứng và phản đối xứng là

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1s\rangle|2p, m_l = 1\rangle + |2p, m_l = 1\rangle|1s\rangle)\,,$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1s\rangle|2p, m_l = 1\rangle - |2p, m_l = 1\rangle|1s\rangle)\,,$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1s\rangle|2p, m_l = 0\rangle + |2p, m_l = 0\rangle|1s\rangle)\,,$$

$$|\psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1s\rangle|2p, m_l = 0\rangle - |2p, m_l = 0\rangle|1s\rangle)\,,$$

$$|\psi_5\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1s\rangle|2p, m_l = -1\rangle + |2p, m_l = -1\rangle|1s\rangle)\,,$$

$$|\psi_6\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1s\rangle|2p, m_l = -1\rangle - |2p, m_l = -1\rangle|1s\rangle)\,.$$

Để hàm sóng toàn phần là phản đối xứng, ta phải chọn tích các trạng thái spin đơn tuyến χ_{00} và hàm sóng không gian đối xứng $|\psi_1\rangle$, $|\psi_3\rangle$, $|\psi_5\rangle$, được tạo nên từ ba trạng thái đơn tuyến $|\psi_i\rangle\chi_{00}$ ($i = 1, 3, 5$); và tích của trạng thái spin tam tuyến χ_{11} với hàm sóng không gian phản đối xứng $|\psi_2\rangle$, $|\psi_4\rangle$, $|\psi_6\rangle$, được tạo nên từ 9 trạng thái tam tuyến $|\psi_i\rangle\chi_{11}$ ($i = 2, 4, 6$, $m = 0, \pm 1$). Để kí hiệu 12 trạng thái trong biểu diễn liên kết, ta phải kết hợp những hàm sóng phản đối xứng nói trên. Các hàm sóng của ba trạng thái đơn tuyến là

$$\begin{aligned} {}^1P_1: \quad |m_J = 1\rangle &= |\psi_1\rangle\chi_{00}\,, \\ |m_J = 0\rangle &= |\psi_3\rangle\chi_{00}\,, \\ |m_J = -1\rangle &= |\psi_5\rangle\chi_{00}\,. \end{aligned}$$

Hàm sóng của chín trạng thái tam tuyến là

$$\begin{aligned} {}^3P_2: \quad |m_J = 2\rangle &= |\psi_2\rangle\chi_{11}\,, \\ |m_J = 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_2\rangle\chi_{10} + |\psi_4\rangle\chi_{11})\,, \end{aligned}$$

$$|m_J = 0\rangle = \sqrt{\frac{1}{6}}|\psi_2\rangle\chi_{1,-1} + \sqrt{\frac{2}{3}}|\psi_4\rangle\chi_{10} + \sqrt{\frac{1}{6}}|\psi_6\rangle\chi_{11} ,$$

$$|m_J = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_4\rangle\chi_{1,-1} + |\psi_6\rangle\chi_{10}) ,$$

$$|m_J = -2\rangle = |\psi_6\rangle\chi_{1,-1} .$$

$${}^3P_1 : \quad |m_J = 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_2\rangle\chi_{10} - |\psi_4\rangle\chi_{11}) ,$$

$$|m_J = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_2\rangle\chi_{1,-1} - |\psi_6\rangle\chi_{11}) ,$$

$$|m_J = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_4\rangle\chi_{1,-1} - |\psi_6\rangle\chi_{10}) .$$

$${}^3P_0 : |m_J = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|\psi_2\rangle\chi_{1,-1} - |\psi_4\rangle\chi_{10} + |\psi_6\rangle\chi_{11}) .$$

(b) Vì đám mây điện tử của những quỹ đạo $2p$ phần lớn nằm ngoài đám mây điện tử của quỹ đạo $1s$, giá trị Z của hàm sóng $|1s\rangle$ là 2 và của hàm sóng $|2p\rangle$ là 1. Các mức năng lượng của nguyên tử kiểu nguyên tử hydro được cho bằng

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2} .$$

Do đó, năng lượng của những trạng thái $2p$ trên trạng thái cơ bản là

$$\begin{aligned}\Delta E &= -\frac{mc^2}{2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\left(\frac{1}{2^2} - \frac{2^2}{1}\right) \\ &= \frac{0,51 \times 10^6}{2} \times \left(\frac{1}{137}\right)^2 \times \frac{15}{4} \\ &= 51 \text{ eV} .\end{aligned}$$

Giá trị tối ưu của Z có thể thu được từ những tính toán về hiệu ứng chắn bằng cách sử dụng những hàm sóng đã cho.

(c) Kí hiệu hai tập con các hàm sóng không gian đối xứng và phản đối xứng bằng tham số $\varepsilon = \pm 1$ và viết

$$|\psi_\varepsilon\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1s\rangle|2p\rangle + \varepsilon|2p\rangle|1s\rangle) .$$

Tương tác đẩy giữa các electron,

$$H' = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|},$$

điều này dẫn đến sự tách các mức năng lượng của hai tập hợp hàm sóng. Vì

$$\langle\psi_\varepsilon|H'|\psi_\varepsilon\rangle = \frac{1}{2}(\langle 1s|\langle 2p| + \varepsilon\langle 2p|\langle 1s|)H'(|1s\rangle|2p\rangle + \varepsilon|2p\rangle|1s\rangle)$$
$$= \langle 1s2p|H'|1s2p\rangle + \varepsilon\langle 1s2p|H'|2p1s\rangle,$$

sự tách mức là bằng hai lần tích phân trao đổi trong số hạng thứ hai của vế phải, nghĩa là,

$$K = \int \psi^*_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{1s}(\mathbf{r}_2)\psi^*_{2p}(\mathbf{r}_2)\psi_{2p}(\mathbf{r}_1)\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2.$$

Vì $K > 0$, năng lượng của trạng thái tam tuyến ($\varepsilon = -1$) là thấp hơn so với trạng thái đơn tuyến. (Điều này đúng như dự kiến bởi vì khi hàm sóng không gian là phản đối xứng, hai electron có spin song song và do đó chúng có xu hướng tránh xa nhau).

(d) Quy tắc lọc lựa cho chuyển dời bức xạ lưỡng cực điện là $\Delta L = 0, \pm 1$; $\Delta S = 0$; $\Delta J = 0, +1$ và có sự thay đổi của chẵn lẻ. Do đó, trạng thái có thể chuyển dời sang trạng thái cơ bản $^1S_0$ là trạng thái $^1P_1$.

(e) Các trạng thái kích thích này là tồn tại. Ví dụ, trạng thái $^3P_1$ của cấu hình điện tử $2p3p$ có thể chuyển dời sang bất kì trạng thái nào trong số các trạng thái $^3P_{2,1,0}$ cao hơn thông qua tương tác lưỡng cực điện.

7029

Hãy giải thích, nếu có thể, điều khẳng định sau đây: "Trong hệ của hai nguyên tử H ở trạng thái cơ bản, sẽ có ba trạng thái đẩy nhau và một trạng thái (liên kết) hút nhau.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Trong gần đúng đoạn nhiệt, khi thảo luận về chuyển động của hai electron trong hai nguyên tử H, ta có thể coi khoảng cách giữa hai hạt nhân là cố định và chỉ xét hàm sóng chuyển động của hai electron. Đối với spin toàn phần

$S = 1$, hàm sóng spin toàn phần là đối xứng đối với hoán vị hai electron và do đó, hàm sóng không gian toàn phần là phản đối xứng. Nguyên lý Pauli đoi hỏi các electron, trong trường hợp có spin song song, chúng sẽ tách nhau càng xa càng tốt. Điều này nghĩa là xác suất để hai electron tiến tới gần nhau là rất nhỏ và trạng thái này là đẩy nhau. Khi $S = 1$ có ba trạng thái như vậy. Đối với spin toàn phần $S = 0$, hàm sóng không gian là đối xứng. Xác suất để electron lại gần nhau là khá lớn và do đó trạng thái này là hút. Khi $S = 0$, chỉ tồn tại một trạng thái như vậy.

7030

Trong một mô hình đơn giản hóa đối với một đơteron, phần thế năng của Hamiltonian là $V = V_a(r) + V_b(r)\mathbf{s}_n \cdot \mathbf{s}_p$. Các toán tử spin đối với hai hạt spin 1/2 là $\mathbf{s}_n$ và $\mathbf{s}_p$; khối lượng là m_n và m_p; V_a và V_b là hàm của khoảng phân cách r của hai hạt.

(a) Bài toán giá trị riêng năng lượng có thể quy về bài toán một chiều đối với một biến r. Hãy viết phương trình một chiều đó.

(b) Giả sử V_a và V_b cả hai là âm hoặc bằng không, hãy cho biết (và giải thích vì sao) trạng thái cơ bản là đơn tuyến hay tam tuyến.

(*Princeton*)

Lời giải:

(a) Trong đơn vị $\hbar = 1$, ta có đối với trạng thái đơn tuyến ($S = 0$) của đơteron, ta có

$$\mathbf{s}_n \cdot \mathbf{s}_p = \frac{1}{2}(\mathbf{s}_n + \mathbf{s}_p)^2 - \frac{1}{2}\mathbf{s}_n^2 - \frac{1}{2}\mathbf{s}_p^2 = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} \times \frac{3}{2} \times 2\right) = -\frac{3}{4}$$

và thế năng

$$V_{\text{đơn tuyến}} = V_a(r) - \frac{3}{4}V_b(r) .$$

Khi đó, Hamiltonian là

$$H = -\frac{1}{2m_n}\nabla_n^2 - \frac{1}{2m_p}\nabla_p^2 + V_a(r) - \frac{3}{4}V_b(r) ,$$

từ đó suy ra Hamiltonian mô tả chuyển động tương đối là

$$H_r = -\frac{1}{2m}\nabla_r^2 + V_a(r) - \frac{3}{4}V_b(r) ,$$

trong đó ∇_r^2 là Laplacian với tọa độ vị trí tương đối $r = |\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n|$, $m = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p}$ là khối lượng rút gọn của hai hạt.

Sau khi tách phần biến góc từ phương trình Schrödinger, các giá trị riêng năng lượng được thu từ phương trình một chiều của phần hàm sóng xuyên tâm $R(r)$

$$-\frac{1}{2mr}\frac{d^2}{dr^2}(rR) + \left[\frac{l(l+1)}{2mr^2} + V_a(r) - \frac{3}{4}V_b(r)\right](rR) = E(rR)\,.$$

Tương tự, đối với trạng thái tam tuyến ($S = 1$) ta có

$$V_{\text{tam tuyến}} = V_a(r) + \frac{1}{4}V_b(r)\,,$$

và phương trình một chiều tương ứng là

$$-\frac{1}{2mr}\frac{d^2}{dr^2}(rR) + \left[\frac{l(l+1)}{2mr^2} + V_a(r) + \frac{1}{4}V_b(r)\right](rR) = E(Rr)\,.$$

(b) Ta sẽ sử dụng bổ đề: Cho bài toán một chiều tìm giá trị riêng của năng lượng, nếu các điều kiện là như nhau trừ việc hai thế năng thỏa mãn bất đẳng thức

$$V'(x) \geq V(x), \quad (-\infty < x < \infty)\,,$$

khi đó, các mức năng lượng tương ứng sẽ thỏa mãn bất đẳng thức $E'_n \geq E_n$. Đối với trạng thái cơ bản, $l = 0$. Vì $V_b \leq 0$ đối với một đơteron bền, $V_{\text{đơn tuyến}} \geq V_{\text{tam tuyến}}$ và do đó trạng thái tam tuyến là trạng thái cơ bản.

7031

(a) Trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro được tách do tương tác siêu tinh tế. Hãy cho biết sơ đồ mức và xuất phát từ những nguyên lý cơ bản hãy chỉ ra trạng thái nào nằm ở mức năng lượng cao hơn.

(b) Trạng thái cơ bản của phân tử hydro được tách thành các trạng thái spin hạt nhân toàn phần tam tuyến và đơn tuyến. Xuất phát từ những nguyên lý cơ bản hãy chỉ ra trạng thái nào nằm ở mức năng lượng cao hơn.

(*Chicago*)

Lời giải:

(a) Tương tác siêu tinh tế là tương tác giữa mômen từ riêng μ_p của proton trong hạt nhân với từ trường $\mathbf{B}_e$ do cấu trúc electron bên ngoài sinh ra, và

nó diễn tả bằng Hamiltonian $H_{hf} = -\mu_p \cdot \mathbf{B}_e$. Đối với trạng thái cơ bản, mật độ xác suất cho electron có đối xứng cầu và do đó $\mathbf{B}_e$ có thể coi như có cùng phương với μ_e, là mômen từ riêng của electron. Khi đó, vì

$$\mu_e = -\frac{e}{m_e c}\mathbf{s}_e, \quad \mu_p = \frac{e g_p}{2m_p c}\mathbf{s}_p, \quad (g_p > 0)$$

$\mathbf{B}_e$ là ngược chiều với $\mathbf{s}_e$ và $-\langle \mu_p \cdot \mathbf{B}_e \rangle$ sẽ cùng dấu với $\langle \mathbf{s}_e \cdot \mathbf{s}_p \rangle$.

Gọi $\mathbf{S} = \mathbf{s}_e + \mathbf{s}_p$ và xét các trạng thái riêng của $\mathbf{S}^2$ và S_z. Ta có

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{s}_e \cdot \mathbf{s}_p \rangle &= \frac{1}{2}\langle \mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_e^2 - \mathbf{s}_p^2 \rangle \\
&= \frac{1}{2}\left[S(S+1)\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2\right] \\
&= \frac{1}{4}[2S(S+1) - 3]\hbar^2 .
\end{aligned}$$

Vì spin của electron và proton đều bằng $\frac{1}{2}\hbar$, ta có

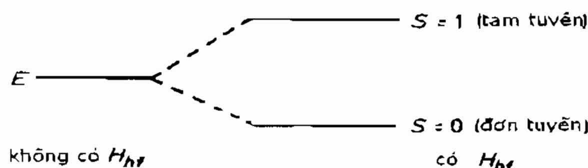
$$S = \begin{cases} 0, & \text{trạng thái đơn tuyến,} \\ 1, & \text{trạng thái tam tuyến,} \end{cases}$$

và tương ứng

$$\langle \mathbf{s}_e \cdot \mathbf{s}_p \rangle = \begin{cases} -\frac{3}{4}\hbar^2 < 0, & \text{trạng thái đơn tuyến,} \\ \frac{1}{4}\hbar^2 > 0, & \text{trạng thái tam tuyến.} \end{cases}$$

Tương tác siêu tinh tế gây nên sự tách mức cơ bản thành hai trạng thái, $S = 0$ và $S = 1$ (tương ứng là các trạng thái spin toàn phần đơn tuyến và tam tuyến). Vì H_{nf} có cùng dấu với $\langle \mathbf{s}_e \cdot \mathbf{s}_p \rangle$, nên năng lượng của trạng thái tam tuyến là cao hơn. Sơ đồ các mức năng lượng của trạng thái cơ bản được vẽ trong Hình 7.8.

Về mặt vật lý, sự tách mức siêu tinh tế được gây nên bởi tương tác giữa mômen từ riêng của electron và proton. Đối với electron mômen từ riêng là ngược chiều với spin; trong khi đối với proton mômen từ riêng lại cùng chiều với spin. Đối với spin tam tuyến, spin của electron và của proton là cùng chiều và do đó, mômen từ là ngược chiều. Đối với spin đơn tuyến, tình trạng là ngược lại. Nếu hàm sóng không gian là như nhau, tương tác Coulomb giữa electron và proton là cao hơn đối với trạng thái tam tuyến.



Hình 7.8

(b) Đối với phân tử hydro H_2, vì proton là fermion, hàm sóng toàn phần phải phản đối xứng đối với việc hoán vị hai proton. Khi đó, đối với đơn tuyến spin hạt nhân, số lượng tử quay chỉ có thể là $L = 0, 2, 4 \ldots$, trong đó $L = 0$ có năng lượng thấp nhất; đối với tam tuyến spin, số lượng tử quay chỉ có thể là $L = 1, 3, 5, \ldots$, trong đó $L = 1$ có năng lượng thấp nhất. Vì hiệu năng lượng sinh ra bởi hiệu của L là lớn hơn cái sinh ra bởi hiệu spin hạt nhân, cho nên, năng lượng của trạng thái $L = 1$ (spin hạt nhân toàn phần $S = 1$) sẽ cao hơn so với của trạng thái $L = 0$ (spin hạt nhân toàn phần $S = 0$). Như vậy, đối với sự tách mức trạng thái cơ bản của H_2, tam tuyến spin hạt nhân ($S = 1$) sẽ có năng lượng cao hơn.

Do hàm sóng không gian của các trạng thái $L = 1$ và $L = 0$ tương ứng là phản đối xứng và đối xứng, nên xác suất để proton lại gần là lớn hơn trong trường hợp sau so với trường hợp trước, do đó năng lượng tương tác Coulomb sẽ cao hơn (đối với cùng số lượng tử chính n). Tuy nhiên, hiệu giữa năng lượng của $L = 1$ và $L = 0$ sẽ lớn hơn đối với các mức năng lượng quay so với các mức năng lượng Coulomb. Do đó, đối với sự tách trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro, tam tuyến hạt nhân ($S = 1$) có năng lượng cao hơn.

7032

Hàm sóng của hệ hai nguyên tử hydro có thể được mô tả gần đúng thông qua hàm sóng kiểu hydro.

(a) Hãy viết hàm sóng đầy đủ cho trạng thái thấp nhất và cho cấu hình spin đơn tuyến và tam tuyến. Hãy vẽ đồ thị diễn tả phần không gian của mỗi hàm sóng coi như một hàm đối với khoảng cách nối hai nguyên tử.

(b) Hãy vẽ đồ thị thế năng hiệu dụng đối với các nguyên tử trong hai trường hợp như là hàm đối với khoảng phân cách giữa hai hạt nhân. (Bỏ qua chuyển động quay của hệ). Hãy giải thích nguồn gốc vật lý các đặc trưng của

đường cong, và những khác biệt giữa chúng.

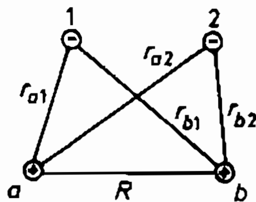
(*Wisconsin*)

Lời giải:

Hamiltonian của hệ hai nguyên tử hydro có thể viết là $H = H_n + H_e$, và tương ứng với nó, hàm sóng toàn phần là $\psi = \psi_n \phi$, tạo nên từ phần hạt nhân ψ_n và phần electron ϕ, với

$$\psi_n = \begin{cases} R_\nu(r) Y_{Im}(\theta, \varphi) \chi_0, & \text{đối với } I = \text{chẵn, (para-hydro)}, \\ R_\nu(r) Y_{Im}(\theta, \varphi) \chi_1, & \text{đối với } I = \text{lẻ, (ortho-hydro)}, \end{cases}$$

trong đó ν kí hiệu số lượng tử dao động, I kí hiệu số lượng tử quay, còn χ_0, χ_1 là hàm sóng đơn tuyến và tam tuyến hạt nhân.



Hình 7.9

(a) Cấu hình của hệ được chỉ rõ trong Hình 7.9. Hàm sóng của một electron được chọn xấp xỉ bằng

$$\varphi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\lambda}{a}\right)^{3/2} e^{-\lambda r/a} .$$

Chú ý rằng, khi $\lambda = 1$, $\varphi(r)$ là hàm sóng của một electron trong trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro. Đối với hai electron, hàm sóng trạng thái đơn tuyến thấp nhất

$$\phi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi(r_{a1})\varphi(r_{b2}) + \varphi(r_{a2})\varphi(r_{b1})] \chi_{0e} ,$$

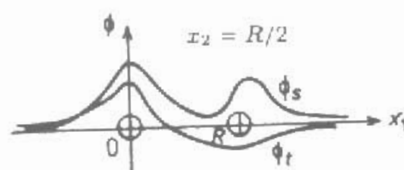
và hàm sóng trạng thái tam tuyến thấp nhất là

$$\phi_t = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi(r_{a1})\varphi(r_{b2}) - \varphi(r_{a2})\varphi(r_{b1})] \chi_{1e} ,$$

trong đó χ_{0e} và χ_{1e} là hàm sóng spin đơn tuyến và tam tuyến. Chọn trục x theo ab với gốc tại a, ta có thể diễn tả phần không gian của ϕ_s và ϕ_t bằng

$$\phi_s = b(e^{-k|x_1|}e^{-k|R-x_2|} + e^{-k|x_2|}e^{-k|R-x_1|}),$$
$$\phi_t = b(e^{-k|x_1|}e^{-k|R-x_2|} - e^{-k|x_2|}e^{-k|R-x_1|}).$$

Giữ một biến (chọn x_2) cố định, ta phác họa sự biến thiên của hàm sóng không gian với biến còn lại trong Hình 7.10. Ta thấy rằng, nếu một electron tiến tới gần hạt nhân, xác suất sẽ lớn khi electron kia tiến đến gần hạt nhân còn lại.

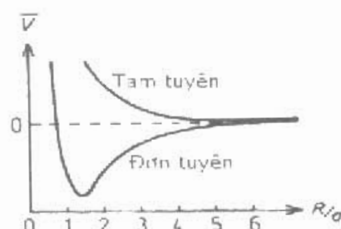


Hình 7.10

(b)

$$V = -\left(\frac{1}{r_{a1}} + \frac{1}{r_{a2}} + \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{b2}}\right)e^2 + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R} + V_0 .$$

Thế năng hiệu dụng, $\bar{V} \equiv \langle\phi|V|\phi\rangle$, đối với trạng thái cơ bản như là hàm đối với R/a đã được vẽ như trong Hình 7.11. Có thể thấy rằng, thế năng tiến tới không khi các nguyên tử trung hòa rời xa nhau ra vô hạn: $R \to \infty$, $\bar{V} \to 0$. Khi $R \to 0$, thế năng giữa hai hạt nhân hydro trở nên vô cùng lớn trong khi thế năng giữa các electron và hạt nhân lại hữu hạn, tương tự như thế năng của một nguyên tử He. Do đó, $R \to 0$, $\bar{V} \to +\infty$.



Hình 7.11

Vì R giảm từ một giá trị lớn, thế đẩy giữa các hạt nhân sẽ tăng lên, cùng một lúc, thế đẩy giữa electron và hạt nhân cũng lại tăng theo, dẫn đến sự cạnh tranh giữa chúng. Đối với trạng thái đơn tuyến, xác suất để các electron tiến đến gần hạt nhân bên kia là lớn, và do đó, thế năng sẽ có giá trị cực tiểu. Đối với trạng thái tam tuyến, xác suất để các electron tiến lại gần các hạt nhân là nhỏ, và do đó, việc giảm thế năng do lực hút giữa các electron và hạt nhân, mà nó la âm, sẽ có giá trị nhỏ, còn lực đẩy giữa các hạt nhân, mà nó là dương, sẽ là phần chủ đạo của thế năng toàn phần. Do đó, $\bar{V} > 0$ và cực tiểu không xảy ra.

7033

(a) Sử dụng hàm sóng trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro (bao gồm cả spin electron), hãy viết hàm sóng cho phân tử hydro, thỏa mãn nguyên lý loại trừ Pauli. Bỏ qua các số hạng tương ứng với trường hợp cả hai electron đều quay quanh một hạt nhân. Hãy phân loại hàm sóng theo spin toàn phần của chúng.

(b) Giả sử rằng, trong Hamiltonian chỉ có số hạng thế năng gây bởi lực Coulomb, hãy thảo luận một cách định tính năng lượng của các trạng thái nói trên, trong trường hợp khoảng cách giữa các hạt nhân trong phân tử là thông thường và trong trường hợp giới hạn khi khoảng cách này rất lớn.

(c) Lực trao đổi sẽ có ý nghĩa gì?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Cấu hình của phân tử hydro được vẽ trong Hình 7.9. Kí hiệu hàm sóng trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro là $|100\rangle$ và gọi $\varphi(\mathbf{r}) = (|100\rangle)^\lambda$, trong đó λ là một tham số sẽ được xác định. Khi đó, hàm sóng trạng thái đơn tuyến ($S = 0$) của phân tử hydro là

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi(\mathbf{r}_{a1})\varphi(\mathbf{r}_{b2}) + \varphi(\mathbf{r}_{a2})\varphi(\mathbf{r}_{b1})]\chi_{00},$$

và hàm sóng trạng thái tam tuyến ($S = 1$) là

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi(\mathbf{r}_{a1})\varphi(\mathbf{r}_{b2}) - \varphi(\mathbf{r}_{a2})\varphi(\mathbf{r}_{b1})]\chi_{1M}$$

với $M = -1, 0, 1$.

(b) Năng lượng của nguyên tử hydro là

$$
\begin{aligned}
E_{H_2} &= -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{mc^2}{2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\frac{1}{n^2} \\
&= -\frac{0,511\times 10^6}{2}\times\left(\frac{1}{137}\right)^2\frac{1}{n^2} \\
&= -\frac{13,6}{n^2}\ \text{eV}\,.
\end{aligned}
$$

Như vậy, tổng năng lượng hai trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro là $-2\times 13,6 = -27,2$ eV. Mặt khác, với nguyên tử He, cũng có chứa hai proton và hai electron, năng lượng của trạng thái cơ bản là

$$
\begin{aligned}
E_{\text{He}} &= -2\times\frac{mZ'^2e^4}{2\hbar^2} = -2\times 13,6\times\left(2-\frac{5}{16}\right)^2 \\
&= -77,5\ \text{eV}\,.
\end{aligned}
$$

trong đó, thừa số 2 là cho hai electron của nguyên tử He và $Z' = 2 - \frac{5}{16}$ là số điện tích hiệu dụng của hạt nhân He.

(i) Đối với trạng thái đơn tuyến, xác suất để hai electron đến gần nhau là rất lớn (theo nguyên lý loại trừ Pauli), điều này làm tăng thế năng đẩy của tương tác trao đổi giữa chúng. Xác suất để hai electron lại gần hạt nhân cũng là rất lớn và có xu hướng làm tăng thế hút của tương tác trao đổi. Khi tính đến cả hai điều đó, thế tương tác trao đổi sẽ làm giảm năng lượng. Có thể nhận thấy dễ dàng rằng, đối với trạng thái đơn tuyến, $-77,5$ eV $< E_1 < -27,2$ eV. Đối với trạng thái tam tuyến, spin là cùng chiều do đó hàm sóng không gian là phản đối xứng. Trong trường hợp đó, thế năng là tăng do tương tác trao đổi và do đó, $E_3 > -27,2$ eV, và điều đó gây khó khăn cho việc tạo thành trạng thái liên kết.

(ii) Khi khoảng cách giữa các hạt nhân $\to\infty$, H_2 quy về hai nguyên tử hydro tách biệt. Do đó, năng lượng $\to -27,2$ eV.

(c) Tính đối xứng và phản đối xứng của hàm sóng gây nên sự dịch chuyển trung bình cho thế năng ở mức

$$
\Delta V = \iint \varphi(\mathbf{r}_{a1})\varphi(\mathbf{r}_{b2})V\varphi(\mathbf{r}_{a2})\varphi(\mathbf{r}_{b1})d\tau_1 d\tau_2\,.
$$

Việc này thường được nói là, nó gây nên bởi "lực trao đổi".

7034

Hãy mô tả những trạng thái thấp nhất của phân tử H_2. Hãy cho một ước lượng thô đối với giá trị của các năng lượng kích thích. Hãy nêu các đặc điểm của bức xạ chuyển dời từ những trạng thái kích thích đầu tiên về trạng thái cơ bản.

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Khi xem xét một cách gần đúng phân tử hydro, hàm sóng bậc không được lấy bằng tích hai hàm sóng trạng thái cơ bản của nguyên tử kiểu hydro

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\lambda}{a_0}\right) e^{-\lambda r/a_0} ,$$

trong đó a_0 là bán kính Bohr, λ là tham số sẽ được xác định. Phần spin trong hàm sóng electron của trạng thái cơ bản của phân tử H_2, $(S = 0)$ là phản đối xứng, và do đó nó đòi hỏi phần không gian là đối xứng. Vì spin của hai electron là ngược chiều nhau, chúng sẽ tiến đến khá gần nhau (theo nguyên lý Pauli). Điều này nghĩa là, mật độ của "đám mây điện tử" sẽ khá lớn trong vùng không gian giữa hai hạt nhân. Trong vùng đó, thế hấp dẫn giữa hai electron và hai hạt nhân là khá lớn và như vậy có thể tạo thành trạng thái liên kết, với hàm sóng là

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi(\mathbf{r}_{a1})\varphi(\mathbf{r}_{b2}) + \varphi(\mathbf{r}_{a2})\varphi(\mathbf{r}_{b1})]\chi_{00} ,$$

trong đó, các biến số được chỉ ra trong Hình 7.9.

Nếu spin của electron là cùng chiều $(S = 1)$, khi đó hàm sóng không gian phải phản đối xứng, xác suất để hai electron tiến lại gần nhau là rất nhỏ, và trạng thái liên kết là không thể xảy ra.

Về phần các mức năng lượng liên quan đến chuyển động electron, dao động và quay của H_2, các mức quay có khoảng cách giữa hai mức cạnh nhau là nhỏ nhất. Để đơn giản, ta sẽ chỉ xét những mức năng lượng với electron ban đầu trong trạng thái cơ bản và khi không có dao động giữa các hạt nhân. Không làm mất tính tổng quát, ta chọn năng lượng của phương trình là bằng không khi không có chuyển động quay. Các mức năng lượng quay được cho

bằng

$$E = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)\,,$$

trong đó, I là mômen quán tính và J là mômen xung lượng toàn phần của hệ hai hạt nhân. Khi J chẵn, spin toàn phần của hai proton trong H_2 là $S = 0$ và ta có para-hydro, còn khi J lẻ, spin toàn phần của hai proton là $S = 1$ và kết quả là ta có ortho-hydrogen. Giả sử khoảng cách giữa hai proton là $R = 1,5 \times 0,53 = 0,80$ Å (Hình 7.11). Bởi vì

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar^2}{2I} &= \frac{\hbar^2}{\mu R^2} = \frac{1}{\mu c^2}\left(\frac{\hbar c}{R}\right)^2 \\
&= \frac{2}{938 \times 10^6}\left(\frac{6,582 \times 10^{-16} \times 3 \times 10^{10}}{0,8 \times 10^{-8}}\right)^2 \\
&= 1,3 \times 10^{-2}\ \text{eV}\,,
\end{aligned}$$

năng lượng của các trạng thái thấp sẽ là

Para-hydro:			
J	0	2	4
$E(10^{-2}$ eV)	0	7,8	26,0

Ortho-hydro:			
J	1	3	5
$E(10^{-2}$ eV)	2,6	15,6	39,0

Vì tương tác giữa hai nguyên tử là độc lập với spin, para-hydro và ortho - hydro không thể chuyển đổi lẫn nhau, do đó, quy tắc lọc lựa ΔJ = chẵn. Trong tự nhiên, tỉ số giữa số phân tử ortho-hydro và para-hydro là 3:1. Điều này có nghĩa là vạch quang phổ ứng với chuyển dời $J = 2 \to J = 0$ là yếu hơn so với $J = 3 \to J = 1$.

7035

Ma trận mật độ đối với một tập các nguyên tử với spin J là ρ. Nếu các spin chịu tác dụng của một từ trường thăng giáng ngẫu nhiên, người ta thấy rằng ma trận mật độ sẽ thỏa mãn phương trình

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{T}[\mathbf{J}_{op} \cdot \rho \mathbf{J}_{op} - J(J+1)\rho]\,.$$

Chứng minh rằng phương trình hồi phục kéo theo phương trình

(a) $\frac{\partial}{\partial t}\langle J_z\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\mathrm{Tr}(J_{op}\rho) = -\frac{1}{T}\langle J_z\rangle\,,$

(b) $\frac{\partial}{\partial t}\langle J_z^2\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\mathrm{Tr}(J_z^2\rho) = -\frac{3}{T}\langle J_z^2\rangle + \frac{J(J+1)}{T}\,.$

[Gợi ý: Sử dụng toán tử nâng hạ]

(*Columbia*)

Lời giải:

Từ định nghĩa, $\langle J_z\rangle = \mathrm{Tr}(\rho J_z)$. Như vậy, ta có

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle J_z\rangle = \mathrm{Tr}\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}J_z\right) = \frac{1}{T}\mathrm{Tr}(\mathbf{J}_{op}\cdot\rho\mathbf{J}_{op}J_z - J(J+1)\rho J_z]$$
$$= \frac{1}{T}\mathrm{Tr}[J_x\rho J_xJ_z + J_y\rho J_yJ_z + J_z\rho J_z^2 - J(J+1)\rho J_z]\,.$$

Vì

$$\mathrm{Tr}AB = \mathrm{Tr}BA\,,$$

$$J_xJ_y - J_yJ_x = iJ_z\,,$$

$$J_yJ_z - J_zJ_y = iJ_x\,,$$

$$J_zJ_x - J_xJ_z = iJ_y\,,$$

$$\mathbf{J}^2J_z = J(J+1)J_z\,,$$

(dùng hệ đơn vị trong đó $\hbar = 1$) ta có

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle J_z\rangle = \frac{1}{T}\mathrm{Tr}[\rho J_xJ_zJ_x + \rho J_yJ_zJ_y + \rho J_z^3 - \rho J(J+1)J_z]$$
$$= \frac{1}{T}\mathrm{Tr}\{\rho[(J_x^2 + J_y^2 + J_z^2)J_z + iJ_xJ_y - iJ_yJ_x - J(J+1)J_z]\}$$
$$= -\frac{1}{T}\mathrm{Tr}(\rho J_z) = -\frac{1}{T}\langle J_z\rangle\,.$$

(b)

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\langle J_z^2\rangle &= \frac{1}{T}\mathrm{Tr}\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}J_z^2\right)\\
&= \frac{1}{T}\mathrm{Tr}[J_x\rho J_x J_z^2 + J_y\rho J_y J_z^2 + J_z\rho J_z^3 - J(J+1)\rho J_z^2]\\
&= \frac{1}{T}\mathrm{Tr}[\rho J_x J_z^2 J_x + \rho J_y J_z^2 J_y + \rho J_z^4 - \rho J(J+1)J_z^2]\\
&= \frac{1}{T}\mathrm{Tr}[\rho(J_x J_z J_x J_z + J_y J_z J_y J_z + iJ_x J_z J_y - iJ_y J_z J_x + J_z^4)\\
&\quad - J(J+1)\rho J_z^2]\\
&= \frac{1}{T}\mathrm{Tr}\{\rho[J_x^2 J_z^2 + J_y^2 J_z^2 + J_z^4 + iJ_x J_y J_z - iJ_y J_x J_z + iJ_x J_z J_y\\
&\quad - iJ_y J_z J_x - J(J+1)J_z^2]\}\\
&= \frac{1}{T}\mathrm{Tr}\{\rho[i(iJ_z)J_z + iJ_x(J_y J_z) + iJ_x(-iJ_x) - iJ_y(J_x J_z)\\
&\quad - iJ_y(iJ_y)]\}\\
&= \frac{1}{T}\mathrm{Tr}\{\rho[-J_z^2 + J_x^2 + J_y^2 + i(iJ_z)J_z]\}\\
&= \frac{1}{T}\mathrm{Tr}\{\rho[-3J_z^2 + (J_x^2 + J_y^2 + J_z^2)]\}\\
&= -\frac{3}{T}\langle J_z^2\rangle + \frac{J(J+1)}{T}\,,
\end{aligned}
$$

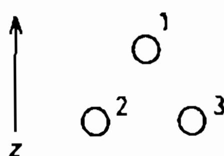
bởi vì

$$
\frac{1}{T}\mathrm{Tr}[\rho J(J+1)] = \langle J(J+1)\rangle = J(J+1)\,.
$$

7036

Một phân tử được tạo nên từ ba nguyên tử đồng nhất nằm ở đỉnh của một tam giác đều như được vẽ trong Hình 7.12. Ta sẽ xét ion của nó được tạo nên bằng cách thêm một electron với một biên độ nào đó vào mỗi đỉnh. Giả sử phần tử ma trận của Hamiltonian đối với electron ở hai vị trí kề nhau i, j là $\langle i|H|j\rangle = -a$ với $i \neq j$.

(a) Hãy tính sự tách mức năng lượng.



Hình 7.12

(b) Giả sử một điện trường được đặt thêm vào theo trục z sao cho thế năng đối với electron trên đỉnh bị thấp đi một lượng b với $|b| \ll |a|$. Bây giờ hãy tính các mức.

(c) Giả sử electron ở trong trạng thái cơ bản. Đột nhiên trường bị quay đi một góc 120° và hướng về phía điểm 2. Hãy tính xác suất để electron vẫn nằm ở trạng thái cơ bản.

(*Princeton*)

Lời giải:

(a) Kí hiệu các vectơ cơ sở là $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ và đặt $\langle i|H|i\rangle = E_0$, $i = 1, 2, 3$. Khi đó

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -a & -a \\ -a & E_0 & -a \\ -a & -a & E_0 \end{pmatrix}.$$

Để chéo hóa H, ta giải phương trình

$$\begin{vmatrix} E_0 - \lambda & -a & -a \\ -a & E_0 - \lambda & -a \\ -a & -a & E_0 - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Nghiệm thu được là các mức năng lượng $E_{1,2} = E_0 + a$ (suy biến bội hai) và $E_3 = E_0 - 2a$.

(b) Ma trận H bây giờ là

$$H = \begin{pmatrix} E_0 - b & -a & -a \\ -a & E_0 & -a \\ -a & -a & E_0 \end{pmatrix}.$$

Các mức năng lượng chéo hóa nó là

$$E_1 = E_0 + a\,,$$

$$E_2 = E_0 - \frac{a + b + \sqrt{(a-b)^2 + 8a^2}}{2}\,,$$

$$E_3 = E_0 - \frac{a + b - \sqrt{(a-b)^2 + 8a^2}}{2}\,.$$

E_2 là mức năng lượng thấp nhất và tương ứng với trạng thái cơ bản, với hàm sóng

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{(E_0 - E_2 - a)^2 + 2a^2}}[(E_0 - E_2 - a)|1\rangle + a|2\rangle + a|3\rangle]\,.$$

(c) Sau khi quay trường, hệ có cùng cấu hình như trước nhưng vị trí bị thay đổi lại tên

$$1 \to 2, 2 \to 3, 3 \to 1\,.$$

Từ đó, trạng thái cơ bản mới là

$$\psi_0' = \frac{1}{\sqrt{(E_0 - E_2 - a)^2 + 2a^2}}[a|1\rangle + (E_0 - E_2 - a)|2\rangle + a|3\rangle]\,.$$

Do đó, xác suất để electron vẫn nằm ở trạng thái cơ bản là

$$|\langle\psi_0'|\psi_0\rangle|^2 = \left[\frac{2a(E_0 - E_2 - a) + a^2}{(E_0 - E_2 - a)^2 + 2a^2}\right]^2\,.$$

7037

Xét ba hạt, mỗi hạt có khối lượng m, chuyển động một chiều và được liên kết với nhau bằng lực điều hòa, nghĩa là,

$$V = \frac{1}{2}[(x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + (x_3 - x_1)^2]\,.$$

(a) Hãy viết phương trình Schrödinger cho hệ.

(b) Hãy đổi sang hệ tọa độ khối tâm, ở đó hàm sóng và năng lượng riêng có thể giải được chính xác.

(c) Bằng cách sử dụng (b) hãy tìm năng lượng trạng thái cơ bản nếu các hạt là các boson đồng nhất.

(d) Năng lượng của trạng thái cơ bản là bao nhiêu nếu các hạt là fermion đồng nhất có spin 1/2?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Vì

$$E = \sum_{i=1}^{3} \frac{p_i^2}{2m} + V ,$$

Phương trình Schrödinger là

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}\right)\psi + \frac{k}{2}[(x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + (x_3 - x_1)^2]\psi .$$

(b) Sử dụng tọa độ Jacobi

$$\begin{cases} y_1 = x_1 - x_2 , \\ y_2 = \dfrac{x_1 + x_2}{2} - x_3 , \\ y_3 = \dfrac{x_1 + x_2 + x_3}{3} , \end{cases}$$

hay

$$\begin{cases} x_1 = y_3 + \dfrac{y_1}{2} + \dfrac{y_2}{3} , \\ x_2 = y_3 - \dfrac{y_1}{2} + \dfrac{y_2}{3} , \\ x_3 = y_3 - \dfrac{2}{3}y_2 , \end{cases}$$

ta có

$$V = \frac{k}{2}\left(\frac{3}{2}y_1^2 + 2y_2^2\right) ,$$

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{p_i^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{3}\frac{\partial^2}{\partial y_3^2} + 2\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{3}{2}\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}\right) ,$$

và từ đó phương trình giá trị riêng dừng sẽ là

$$E_T\psi = -\frac{\hbar^2}{6m}\frac{\partial^2\psi}{\partial y_3^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\left\{2\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{3}{2}\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}\right\}\psi + \frac{k}{2}\left\{\frac{3}{2}y_1^2 + 2y_2^2\right\}\psi .$$

Thử tìm nghiệm dưới dạng

$$\psi = Y(y_3)\phi(y_1, y_2) .$$

Phương trình được tách thành hai phương trình

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{6m}\dfrac{\partial^2 Y}{\partial y_3^2} = E_c Y , \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(2\dfrac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \dfrac{3}{2}\dfrac{\partial^2}{\partial y_2^2}\right)\phi + \dfrac{k}{2}\left(\dfrac{3}{2}y_1^2 + 2y_2^2\right)\phi = E\phi , \end{cases}$$

trong đó $E_c = E - E_T$ là năng lượng sinh ra do chuyển động của khối tâm. Phương trình thứ nhất cho

$$Y = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\sqrt{6mE_c}\,y_3/\hbar} .$$

với

$$\phi = \phi_1(y_1)\phi_2(y_2)$$

Phương trình thứ hai được tách thành hai phương trình

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{m}\dfrac{\partial^2\phi_1}{\partial y_1^2} + \dfrac{3}{4}ky_1^2\phi_1 = E_1\phi_1 , \\ -\dfrac{3\hbar^2}{4m}\dfrac{\partial^2\phi_2}{\partial y_2^2} + ky_2^2\phi_2 = E_2\phi_2 . \end{cases}$$

trong đó $E = E_1 + E_2$.

Đây là các phương trình dao động tử điều hòa có khối lượng $\frac{m}{2}$, $\frac{2m}{3}$ và độ cứng tương ứng là $2k$ và $3k$, cả hai đều mang cùng tần số góc $\omega = \sqrt{\frac{3k}{m}}$. Như vậy, năng lượng toàn phần là

$$E = E_1 + E_2 = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{3k}{m}} + \left(l + \frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{3k}{m}} ,$$

với $n, l = 0, 1, 2, 3, \ldots$.

(c) Đặt $\alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$. Hàm sóng trạng thái cơ bản của ϕ_1, ϕ_2 là

$$\phi_{10}(y_1) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\alpha} \exp\left(-\frac{1}{4}\alpha^2 y_1^2\right),$$

$$\phi_{20}(y_2) = \left(\frac{2}{3\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\alpha} \exp\left(-\frac{1}{3}\alpha^2 y_2^2\right),$$

và do đó

$$\phi_0(y_1, y_2) = \phi_{10}(y_1)\phi_{20}(y_2) = \left(\frac{1}{3\pi^2}\right)^{1/4} \alpha \exp\left[\frac{-\alpha^2}{12}(3y_1^2 + 4y_2^2)\right],$$

trong đó

$$\begin{aligned} 3y_1^2 + 4y_2^2 &= 3(x_1 - x_2)^2 + (x_1 + x_2 - 2x_3)^2 \\ &= 4(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - x_1x_2 - x_2x_3 - x_3x_1). \end{aligned}$$

Vì $y_3 = \frac{1}{3}(x_1 + x_2 + x_3)$ nên hiển nhiên là hàm sóng không gian ψ_0 phải đối xứng đối với hoán vị hai hạt, như yêu cầu chung của các boson đồng nhất. Năng lượng trạng thái cơ bản của ba boson, trừ năng lượng tịnh tiến của khối tâm, là

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{3k}{m}} + \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{3k}{m}} = \hbar\sqrt{\frac{3k}{m}}.$$

(d) Nếu các hạt là fermion đồng nhất có spin 1/2, vì spin không nằm trong biểu thức của Hamiltonian, hàm riêng là tích của hàm sóng không gian và hàm sóng spin, và phải là phản đối xứng đối với hoán vị các hạt.

Đối với phép biến đổi tọa độ trong (b), ta có thể dùng

$$\begin{cases} y_1' = x_2 - x_3, \\ y_2' = \dfrac{x_2 + x_3}{2} - x_1, \\ y_3' = \dfrac{x_1 + x_2 + x_3}{3} \end{cases}$$

và cũng thu được cùng kết quả như trước. Trong trường hợp đó hàm riêng không gian là

$$\psi(y_1', y_2', y_3') = \phi_{1n}(y_1')\phi_{2l}(y_2')Y(y_3')$$

và năng lượng là

$$E = (n + l + 1)\hbar\sqrt{\frac{3k}{m}}\,.$$

Vì $\phi_{10}(y_1)\phi_{20}(y_2) = \phi_{10}(y_1')\phi_{20}(y_2')$, hàm sóng không gian là đối xứng đối với phép hoán vị hai hạt. Tuy nhiên, đối với ba fermion với spin, không thể xây dựng được một hàm sóng spin phản đối xứng. Vì vậy, trạng thái này không thể tạo được từ ba fermion với spin 1/2 và phải xét đến các trạng thái cao hơn.

Quay về hàm sóng của một dao động tử điều hòa, ta thấy rằng phần hàm mũ của $\phi_{1n}(y_1)\phi_{2l}(y_2)$ cũng giống như của $\phi_{10}(y_1)\phi_{20}(y_2)$ và là đối xứng. Đặt

$$\Phi_1 = \phi_{11}(y_1)\phi_{20}(y_2)\,,$$
$$\Phi_2 = \phi_{11}(y_1')\phi_{20}(y_2')\,.$$

và xây dựng hàm sóng toàn phần

$$\Phi = \Phi_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_3 + \Phi_2 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_3 - (\Phi_2 + \Phi_1) \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_3\,.$$

Vì $\Phi_1 = C(x_1 - x_2)$, $\Phi_2 = C(x_2 - x_3)$, $\Phi_1 + \Phi_2 = C(x_1 - x_3)$, trong đó C là đối xứng đối với hoán vị các hạt, Φ là phản đối xứng như yêu cầu chung đối với hệ fermion đồng nhất. Do đó năng lượng trạng thái cơ bản của hệ, không kể năng lượng tịnh tiến của khối tâm, là

$$E_0 = 2\hbar\sqrt{\frac{3k}{m}}\,.$$

PHẦN VIII

CÁC CHỦ ĐỀ KHÁC

8001

Hãy biểu diễn $e^{\begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix}}$ thành ma trận 2×2; với a là một hằng số dương

(Berkeley)

Lời giải 1:

Đặt

$$S(a) = e^{\begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix}} = e^{a\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}} = e^{aA}$$

với

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Vì

$$A^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -I,$$

với I là ma trận đơn vị, ta có

$$\frac{d}{da} S(a) = AS(a),$$

$$\frac{d^2}{da^2} S(a) = A^2 S(a) = -S(a),$$

và do đó

$$S''(a) + S(a) = 0.$$

Nghiệm tổng quát là

$$S(a) = c_1 e^{ia} + c_2 e^{-ia},$$

với điều kiện biên $S(0) = I$, $S'(0) = A$.

Do đó

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = I, \\ c_1 - c_2 = -iA. \end{cases}$$

sẽ cho

$$\begin{cases} c_1 = \dfrac{I - iA}{2}, \\ c_2 = \dfrac{I + iA}{2}. \end{cases}$$

Như vậy

$$\begin{aligned}
S(a) &= \frac{I - iA}{2} e^{ia} + \frac{I + iA}{2} e^{-ia} \\
&= \frac{I}{2}(e^{ia} + e^{-ia}) + \frac{iA}{2}(e^{-ia} - e^{ia}) = I\cos a + A\sin a \\
&= \begin{pmatrix} \cos a & \sin a \\ -\sin a & \cos a \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Lời giải 2:

Đặt $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$. Vì $A^2 = -\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -I$, $A^3 = -A$, $A^4 = I, \ldots$.

$$\begin{aligned}
e^{aA} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n A^n}{n!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^{2k}(-1)^k}{(2k)!} I + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^{2k+1}(-1)^k}{(2k+1)!} A \\
&= \cos aI + \sin aA = \begin{pmatrix} \cos a & \sin a \\ -\sin a & \cos a \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

8002

(a) Tính tổng của chuỗi $y = 1 + 2x + 3x^2 + 4x^3 + \cdots$, $|x| < 1$.

(b) Nếu $f(x) = xe^{-x/\lambda}$ xác định trong khoảng $0 < x < \infty$, hãy tìm giá trị trung bình và giá trị có xác suất lớn nhất của x. Hàm $f(x)$ là mật độ xác suất của x

(c) Hãy tính $I = \int_0^\infty \frac{dx}{4 + x^4}$.

(d) Hãy tìm giá trị riêng và vectơ riêng chuẩn hóa của ma trận

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 2 & 3 & 0 \\ 5 & 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Các vectơ riêng này có trực giao không? Biện luận về vấn đề này.

(*Chicago*)

Lời giải:

(a) Vì $|x| < 1$,

$$y - xy = 1 + x + x^2 + x^3 + \cdots = \frac{1}{(1-x)},$$

hay

$$y = \frac{1}{(1-x)^2}.$$

(b) Giá trị trung bình của x là

$$\bar{x} = \int_0^\infty xf(x)\,dx \Big/ \int_0^\infty f(x)dx$$
$$= \int_0^\infty x \cdot xe^{-x/\lambda}\,dx \Big/ \int_0^\infty xe^{-x/\lambda}dx$$
$$= \lambda\frac{\Gamma(3)}{\Gamma(2)} = 2\lambda.$$

Mật độ xác suất là cực trị khi

$$f'(x) = e^{-x/\lambda} - \frac{1}{\lambda}xe^{-x/\lambda} = 0,$$

nghĩa là tại $x = \lambda$ hoặc $x \to \infty$. Chú ý rằng $\lambda > 0$ nếu $f(x)$ là hữu hạn trong $0 < x < \infty$. Vì

$$f''(\lambda) = -\frac{1}{\lambda}e^{-1} < 0,\ f(\lambda) = \lambda e^{-1} > \lim_{x\to\infty} f(x) = 0,$$

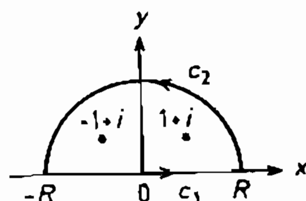
mật độ xác suất là cực đại tại $x = \lambda$. Do đó, giá trị có xác suất lớn nhất của x là λ.

(c) Xét tích phân phức

$$\int_c \frac{dz}{4+z^4} = \int_{c_1}\frac{dz}{4+z^4} + \int_{c_2}\frac{dz}{4+z^4}$$

dọc theo đường cong $c = c_1 + c_2$ như được vẽ trong Hình 8.1.

Hàm dưới dấu tích phân có những điểm kì dị $-1 + i$, $1 + i$ ở bên trong đường cong kín c. Do đó, theo định lý thặng dư ta có



Hình 8.1

$$\oint_c \frac{dz}{4+z^4} = 2\pi i\,[\text{Res}(1+i) + \text{Res}(-1+i)]$$

$$= 2\pi i\left(-\frac{1+i}{16} - \frac{-1+i}{16}\right) = \frac{\pi}{4}\,.$$

Bây giờ cho $R \to \infty$, ta có

$$\int_{c_2} \frac{dz}{4+z^2} \to 0\,.$$

Khi đó, vì

$$\int_{c_1} \frac{dz}{4+z^4} = \int_{-\infty}^{0} \frac{dx}{4+x^4} + \int_0^{\infty} \frac{dx}{4+x^4} = 2\int_0^{\infty} \frac{dx}{4+x^4}\,.$$

ta có

$$\int_0^{\infty} \frac{dx}{4+x^4} = \frac{\pi}{8}\,.$$

(d) Gọi giá trị riêng là E và vectơ riêng là

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}\,.$$

Khi đó

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 2 & 3 & 0 \\ 5 & 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}\,.$$

Để X khác không, cần có

$$\begin{vmatrix} E-1 & -2 & -4 \\ -2 & E-3 & 0 \\ -5 & 0 & E-3 \end{vmatrix} = 0\,.$$

Và nghiệm của phương trình trên là

$$E_1 = 3, \ E_2 = -3, \ E_3 = 7.$$

Thay vào phương trình ma trận, chúng sẽ nhận được các vectơ, mà sau khi chuẩn hóa, là

$$X_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

khi $E = E_1$ và

$$X_2 = \frac{1}{\sqrt{65}} \begin{pmatrix} -6 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix},$$

$$X_3 = \frac{1}{3\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$$

khi $E = E_2, E_3$. Chú ý rằng, các vectơ riêng này không trực giao nhau. Nói chung, chỉ khi ma trận là Hermite, thì các vectơ riêng tương ứng với các giá trị riêng khác nhau của nó mới trực giao nhau.

8003

Hãy trình bày ngắn gọn (bằng một câu) những đóng góp cho vật lý có liên quan đến những cặp tên tuổi sau đây. (Chỗ nào thích hợp, hãy viết một phương trình):

(a) Franck–Hertz

(b) Davison-Germer

(c) Breit-Wigner

(d) Hartree-Fock

(e) Lee-Yang

(f) JuLong-Petit

(g) Cockroft-Walton

(h) Hahn-Strassmann

(i) Ramsauer-Townsend

(j) Thomas-Fermi

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Franck - Hertz kiểm tra bằng thực nghiệm sự tồn tại các mức năng lượng gián đoạn của nguyên tử.

(b) Davison - Germer kiểm tra tính chất sóng của electron bằng cách chứng minh sự nhiễu xạ của chúng khi truyền qua tinh thể.

(c) Breit và Wigner phát minh ra công thức cộng hưởng trong vật lý hạt nhân.

(d) Hartree và Fock phát triển phương pháp trường tự hợp để thu được hàm sóng gần đúng cho hệ nhiều electron.

(e) Lee và Yang đề xuất sự không bảo toàn chẵn lẻ trong tương tác yếu.

(f) Dulong và Petit phát minh tính chất: nhiệt dung nguyên tử là như nhau đối với tất cả các chất rắn ở nhiệt độ cao, và bằng $3R$, trong đó R là hằng số khí lý tưởng.

(g) Cockroft và Walton thực hiện sự phân rã nhân tạo đầu tiên một hạt nhân nguyên tử.

(h) Hahn và Strassmann lần đầu tiên chứng tỏ sự phân hạch của urani dưới tác dụng của nơtron.

(i) Ramsauer và Townsend lần đầu tiên quan sát thấy sự truyền cộng hưởng của electron năng lượng thấp qua các nguyên tử khí hiếm.

(j) Thomas và Fermi đề xuất một mô hình thống kê gần đúng cho cấu trúc kim loại.

8004

Ước lượng độ lớn của các đại lượng sau đây:

(a) Động năng của một nucleon trong một hạt nhân tiêu biểu.

(b) Từ trường tính bằng gauss để có sự tách mức Zeeman trong nguyên tử hydro so sánh được với năng lượng liên kết Coulomb của trạng thái cơ bản.

(c) Số lượng tử n ứng với trạng thái riêng của dao động tử điều hòa có năng lượng tương đương với một dao động tử điều hòa cổ điển một chiều với khối lượng $m = 1$ gam, chu kì $T = 1$ s, biên độ $x_0 = 1$ cm.

(d) Tỉ số giữa độ tách mức siêu tinh tế và năng lượng liên kết trong trạng

thái s của nguyên tử hydro, biểu diễn qua hằng số cấu trúc tinh tế α, khối lượng electron m_e, khối lượng proton m_p.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Động năng $T = \frac{p^2}{2m}$ của nucleon trong hạt nhân có thể được ước lượng bằng cách sử dụng gần đúng $p \sim \Delta p$ và nguyên lý bất định $\Delta x \Delta p \sim h$. Vì $\Delta x \sim 10^{-12}$ cm, $\Delta p \sim \frac{h}{\Delta x}$,

$$T \sim \frac{h^2}{2m}\left(\frac{1}{\Delta x}\right)^2 = \frac{1}{2mc^2}\left(\frac{hc}{\Delta x}\right)^2$$

$$= \frac{1}{2 \times 938 \times 10^6}\left(\frac{4,1 \times 10^{-15} \times 3 \times 10^{10}}{10^{-12}}\right)^2$$

$$\sim \frac{150}{2000} \times 10^8 \sim 10^7 \text{ eV}.$$

(b) Tách mức Zeeman là $\Delta E \sim \mu_B \cdot B$, với μ_B là magneton Bohr, còn năng lượng liên kết Coulomb đối với nguyên tử hydro là 13,6 eV. Để hai năng lượng đó tương đương nhau, ta yêu cầu

$$B \approx \frac{13,6 \times 1,6 \times 10^{-19}}{9,3 \times 10^{-32}} = \frac{13,6 \times 1,6}{9,3} \times 10^{13}\,\text{wbm}^{-2} \sim 10^9\text{Gs}\,.$$

(c) Năng lượng của một dao động tử điều hòa cổ điển một chiều là

$$E = \frac{m}{2}(\omega x_0)^2 = 2\pi^2 m x_0^2/T^2 = 2\pi^2\,\text{erg}\,.$$

Để

$$n\hbar\omega = E\,,$$

ta yêu cầu

$$n = \frac{E}{\hbar\omega} = \frac{2\pi^2}{\hbar\omega} = \frac{\pi T}{\hbar} = \frac{\pi \times 1}{1,054 \times 10^{-27}} = 3 \times 10^{27}\,.$$

(d) Chuyển dịch năng lượng do tách mức cấu trúc siêu tinh tế của một nguyên tử hydro trong trạng thái cơ bản (ở hệ đơn vị $c = \hbar = 1$) là

$$\Delta E \sim m_e^2 \alpha^4 / m_p$$

trong đó α là hằng số cấu trúc tinh tế. Năng lượng liên kết của electron trong trạng thái cơ bản là $E_e = m_e\alpha^2/2$. Do đó

$$\Delta E/E = 2\alpha^2 \left(\frac{m_e}{m_p}\right)$$

8005

Hãy trả lời các câu hỏi sau:

(a) Có thể nói được gì về toán tử Hamiltonian nếu L_z không đổi theo thời gian?

(b) Phát biểu định lý quang học trong lý thuyết tán xạ.

(c) Vì sao định lý quang học không thỏa mãn trong gần đúng Born bậc nhất?

(d) Giải thích vì sao proton không thể có mômen tứ cực điện.

(e) Tìm dấu của độ dịch pha khi một hạt tán xạ trên một thế hút yếu và tầm ngắn? Lý giải các câu trả lời của bạn.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Nếu L_z không đổi theo thời gian, $[H, L_z] = 0$. Điều này nghĩa là trong hệ tọa độ cầu H không chứa góc φ một cách tường minh, và do đó, H bất biến đối với phép quay xung quanh trục z. (Tuy nhiên, H có thể vẫn chứa $\frac{\partial}{\partial\varphi}$ tường minh).

(b) Định lý quang học phát biểu rằng, tiết diện toàn phần đối với tán xạ đàn tính σ_t được cho bởi

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k} Im f(0),$$

trong đó k là số sóng của hạt tới và $f(0)$ là biên độ của sóng tán xạ về phía trước.

(c) Trong gần đúng Born khi $V(r)$ là thực, và đó cũng là trường hợp thường gặp, $f(\theta)$ cũng là thực và cũng cho tiết diện tán xạ toàn phần khác không, phần ảo của $f(\theta)$ chỉ xuất hiện trong gần đúng Born ở bậc cao. Do đó, định lý quang học không áp dụng được cho gần đúng Born bậc nhất.

(d) Từ định nghĩa mômen tứ cực điện và dạng của hàm điều hòa cầu, ta biết rằng, hạt có spin $s < 1$ không thể có mômen tứ cực điện. Điều này cũng bao hàm cả trường hợp proton vì nó có spin $1/2$.

(e) Khi $V(r)$ triệt tiêu nhanh hơn $\frac{1}{r}$, nghĩa là khi thế là tầm ngắn, độ dịch

pha δ_l của sóng riêng phần l sẽ được cho bởi dạng tiệm cận

$$\delta_l \sim -k \int_0^\infty V(r) j_l^2(kr) r^2 dr ,$$

trong đó j_l là hàm Bessel cầu. Do đó, đối với lực hút $V(r) < 0$ và do đó $\delta_l > 0$.

8006

Hãy trả lời sơ lược những câu hỏi sau đây, chỗ nào được, chỉ cần nêu định tính. Hãy đưa ra các lý giải của bạn.

(a) Một chùm nguyên tử trung hòa đi qua một hệ thống thiết bị Stern - Gerlach. Quan sát thấy có năm vạch cách đều nhau. Hỏi mômen xung lượng toàn phần của nguyên tử bằng bao nhiêu?

(b) Mômen từ của nguyên tử trong trạng thái $^3P_0$ bằng bao nhiêu? (Bỏ qua hiệu ứng hạt nhân)

(c) Vì sao các khí hiếm lại trơ về mặt hóa học?

(d) Hãy ước lượng mật độ năng lượng của bức xạ vật đen tuyệt đối trong phòng của bạn bằng đơn vị ergcm^{-3}. Giả sử tất cả các bức tường đều đen.

(e) Trong quá trình phóng điện qua khí hydro, cả hai vạch quang phổ tương ứng với chuyển dời $2^2P_{1/2} \to 1^2S_{1/2}$ và $2^2P_{3/2} \to 1^2S_{1/2}$ đều quan sát thấy. Hãy ước lượng tỉ số cường độ của chúng.

(f) Nguyên nhân gì dẫn đến sự tồn tại hai hệ thống độc lập các vạch quang phổ, hệ thống đơn tuyến và tam tuyến, trong trường hợp nguyên tử hêli?

(*Chicago*)

Lời giải:

(a) Khi nguyên tử trung hòa không phân cực với mômen J đi qua hệ thống thiết bị Stern - Gerlach, chùm tia tới sẽ bị tách ra làm $2J + 1$ vạch. Như vậy, $2J + 1 = 5$, sẽ cho $J = 2$.

(b) Nguyên tử ở trạng thái $^3P_0$ có mômen xung lượng toàn phần là $J = 0$. Do đó, mômen từ bằng không, nếu bỏ qua spin hạt nhân.

(c) Phân tử khí hiếm được tạo nên từ những nguyên tử với các mức năng lượng bị lấp đầy, điều này dẫn đến việc nguyên tử khó mất hoặc khó thu thêm electron. Do đó, khí hiếm là trơ về mặt hóa học.

(d) Mật độ năng lượng của bức xạ vật đen tuyệt đối ở nhiệt độ phòng

$T \approx 300$ K là

$$\mu = \frac{4}{c}\sigma T^4$$
$$= \frac{4}{3\times 10^{10}} \times 5,7 \times 10^{-5} \times 300^4$$
$$= 6\times 10^{-5} \text{ erg/cm}^3 .$$

(e)

$$\frac{I(2^2P_{1/2} \to 1^2S_{1/2})}{I(2^2P_{3/2} \to 1^2S_{1/2})} \approx \frac{2J_1+1}{2J_2+1}$$
$$= \frac{2\times 1/2+1}{2\times 3/2+1} = \frac{1}{2} .$$

(f) Nguyên tử hêli chứa hai electron spin 1/2, và spin toàn phần $\mathbf{S} = s_1 + s_2$ có thể có hai giá trị $S = 1$ (tam tuyến) và $S = 0$ (đơn tuyến). Chuyển dời giữa hai trạng thái là bị cấm do quy tắc lọc lựa $\Delta S = 0$. Kết quả là ta có hai hệ thống vạch quang phổ độc lập trong trường hợp nguyên tử hêli.

8007

(a) Hãy dẫn ra điều kiện áp dụng được của phép gần đúng WKB cho phương trình Schrödinger một chiều không phụ thuộc thời gian và chỉ ra rằng, gần đúng sẽ không còn áp dụng được ở lân cận những điểm hồi chuyển cổ điển.

(b) Sử dụng lý thuyết nhiễu loạn, hãy giải thích vì sao năng lượng trạng thái cơ bản của một nguyên tử sẽ giảm đi khi nguyên tử được đặt vào trong một điện trường ngoài.

(Berkeley)

Lời giải:

(a) Phương pháp WKB xuất phát từ phương trình Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x) ,$$

trong đó ta giả thiết rằng

$$\psi(x) = e^{s(x)/\hbar} .$$

Thay nó vào phương trình Schrödinger, ta có

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{ds}{dx}\right)^2 + \frac{\hbar}{i}\frac{1}{2m}\frac{d^2 s}{dx^2} = E - V(x)\,. \tag{1}$$

Khai triển s thành chuỗi lũy thừa theo $\hbar/i$,

$$s = s_0 + \frac{\hbar}{i}s_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 s_2 + \cdots\,,$$

và thay nó vào phương trình (1), ta thu được

$$\frac{1}{2m}s_0'^2 + \frac{\hbar}{i}\frac{1}{2m}(s_0'' + 2s_0's_1') + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 (s_1'^2 + 2s_0's_2' + s_1'')$$
$$+ \cdots = E - V(x)\,. \tag{2}$$

Nếu ta đặt điều kiện

$$|\hbar s_0''| \ll |s_0'^2|\,, \tag{3}$$
$$|2\hbar s_0's_1'| \ll |s_0'^2|\,, \tag{4}$$

Phương trình (2) sẽ có thể lấy xấp xỉ bằng

$$\frac{1}{2m}s_0'^2 = E - V(x)\,, \tag{5}$$

trong đó ta đã đặt

$$2s_0's_1' + s_0'' = 0\,,$$
$$2s_0's_2' + s_1'^2 + s_1'' = 0\,,$$
$$\cdots\cdots$$

(3) và (4) là điều kiện áp dụng của phương pháp WKB. Lấy tích phân phương trình (5) ta được

$$s_0(x) = \pm\int^x \sqrt{2m(E - V(x))}\,dx = \pm\int^x p\,dx\,,$$

vì vậy (3) có thể viết là

$$\left|\frac{\hbar}{p^2}\frac{dp}{dx}\right| \ll 1\,, \tag{6}$$

nghĩa là,

$$\left|\hbar \frac{d}{dx}\left(\frac{1}{p}\right)\right| \ll 1\,,$$

hay

$$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1\,,$$

trong đó

$$\lambda = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V(x))}}\,.$$

ở gần điểm hồi chuyển $V(x) \sim E$, $p \to 0$ và (6) không thỏa mãn. Vì thế phương pháp WKB không thể dùng được ở gần những điểm hồi chuyển cổ điển.

(b) Xét một nguyên tử nằm trong điện trường ngoài ε theo hướng của trục z. Hamiltonian nhiễu loạn là

$$H' = -e\varepsilon z\,,$$

trong đó $z = \sum_i z_i$ là tổng tọa độ z của các electron trong nguyên tử, và bổ chính năng lượng là

$$\Delta E_0 = H'_{00} + \sum_{n \neq 0} |H'_{on}|^2/(E_0 - E_n)\,.$$

Vì z là một toán tử lẻ và tính chẵn lẻ của trạng thái cơ bản là xác định, $H'_{00} = 0$. Hơn thế nữa$E_0 - E_n < 0$. Do đó, $\Delta E_0 < 0$. Điều này nghĩa là năng lượng của trạng thái cơ bản giảm đi khi nguyên tử được đặt vào trong một điện trường.

8008

Một hạt khối lượng m với mômen xung lượng bằng không trong một thế hút đối xứng cầu $V(r)$.

(a) Hãy viết phương trình vi phân cho hàm sóng xuyên tâm, định nghĩa hàm sóng xuyên tâm một cách cẩn thận và xác định rõ điều kiện biên cho các trạng thái liên kết. Tìm điều kiện giá trị riêng WKB đối với các trạng thái s trong trường thế. (Hãy kết hợp việc phân tích WKB một chiều với những ràng buộc đối với hàm sóng xuyên tâm $(0 < r < \infty)$).

(b) Cho $V(r) = -V_0 \exp(-r/a)$, sử dụng hệ thức WKB, hãy ước lượng giá trị cực tiểu của V_0 sao cho chỉ tồn tại một và chỉ một trạng thái liên kết, đó

chính là liên kết tối thiểu. So sánh giá trị của bạn với kết quả chính xác cho trường hợp thế hàm mũ nói trên, $2mV_0a^2/\hbar^2 = 1,44$.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Hàm sóng của hạt có thể viết như là tích của phần xuyên tâm và phần góc, $\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$. Do đó, $R(r)$ thỏa mãn phương trình

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) + V(r)\right] R(r) = ER(r),$$

trong đó đã tính toán mômen xung lượng bằng không ($l = 0$). Điều kiện biên cho trạng thái liên kết là $R(r)$ hữu hạn đối với $r \to 0$, $R(r) \to 0$ đối với $r \to \infty$.

Đặt $\chi(r) = R(r)/r$, phương trình trên trở thành

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2} + V(r)\chi = E\chi, \quad (0 < r < \infty)$$

và nó thỏa mãn điều kiện

$$\chi(r) \to 0 \quad \text{khi} \quad r \to 0.$$

Như vậy, bài toán trên bây giờ trở thành bài toán cho chuyển động một chiều của một hạt trong thế $V(r)$ xác định chỉ với $r > 0$. Điều kiện giá trị riêng đối với các WKB cho trạng thái s là

$$\oint \sqrt{2m(E-V)}\,dr = \left(n + \frac{3}{4}\right) h, \quad n = 0, 1, 2, \dots.$$

(b) Thay $V = -V_0 \exp(-r/a)$ vào tích phân theo đường kín ta có

$$\int \sqrt{2m[E + V_0 \exp(-r/a)]}\,dr = \frac{1}{2}\left(n + \frac{3}{4}\right) h.$$

Đối với trạng thái liên kết, $E = -|E|$ và tích phân đó trở thành

$$\sqrt{2m|E|}\int_0^{a \ln \frac{V_0}{|E|}} \sqrt{\frac{V_0}{|E|}\exp\left(-\frac{r}{a}\right) - 1}\,dr = \left(n + \frac{3}{4}\right) h/2.$$

Để tính đến điều kiện hữu hạn của V_0 và điều kiện có một và chỉ một trạng thái liên kết, đó là trạng thái liên kết tối thiểu, ta sẽ xét trường hợp giới hạn khi $|E| \approx V_0$. Lúc đó, tích phân bên trái có thể lấy xấp xỉ bằng

$$\sqrt{2mV_0}\int_0^{a \ln \frac{V_0}{|E|}} \exp(-r/2a)dr.$$

Do đó

$$\sqrt{2mV_0}\cdot 2a\left(1-\sqrt{\frac{|E|}{V_0}}\right)\approx\left(n+\frac{3}{4}\right)\frac{\hbar}{2},$$

sẽ cho

$$E\approx-\left[1-\frac{\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\hbar}{2a\sqrt{2mV_0}}\right]^2 V_0\,.$$

Để có một và chỉ một trạng thái liên kết, ta yêu cầu $-E=|E|<V_0$ đối với $n=0$ chứ không phải cho $n=1$, hoặc tương đương

$$\frac{\frac{3}{4}\pi\hbar}{2a\sqrt{2mV_0}}\le 1<\frac{\frac{7}{4}\pi\hbar}{2a\sqrt{2mV_0}}\,.$$

Giá trị cực tiểu của V_0 thỏa mãn điều kiện này là

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}=\frac{9\pi^2}{64}\approx 1,39\,,$$

và nó rất gần với kết quả chính xác 1,44.

8009

Hãy xác lập các phương trình liên quan để ước lượng tất cả các tham số còn thiếu. Liên kết phân tử (độ cứng lò xo) của HCl là cỡ 470 N/m. Mômen quán tính của phân tử này là $2,3\times10^{-47}$ kg·m^2.

(a) Ở 300 K xác suất để phân tử ở trạng thái dao động kích thích thấp nhất là bao nhiêu?

(c) Trong số những phân tử ở trạng thái dao động cơ bản, hãy tính tỉ số giữa số trạng thái chuyển động quay cơ bản và số trạng thái chuyển động quay kích thích đầu tiên?

(*Wisconsin*)

Lời giải:

(a) Hamiltonian cho dao động của hệ là

$$\hat{H}_\nu=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\hat{x}^2\,,$$

và năng lượng các trạng thái dao động là

$$E_v^{(n)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots ,$$

với $\omega = \sqrt{K/\mu}$, K là độ cứng và μ là khối lượng rút gọn của nguyên tử dao động.

Về mặt thống kê, số phân tử ở trạng thái $E^{(n)}$ là tỉ lệ với $\exp(-nx)$, trong đó $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$, k hằng số Boltzmann và T là nhiệt độ tuyệt đối. Như vậy, xác suất để phân tử ở trạng thái kích thích đầu tiên là

$$P_1 = \frac{e^{-x}}{1 + e^{-x} + e^{-2x} + \cdots} = e^{-x}(1 - e^{-x}),$$

Vì

$$\mu = \left(\frac{1 \times 35}{1 + 35}\right) m_p \approx m_p = 1,67 \times 10^{-27}\text{kg},$$

$$x = \frac{\hbar\omega}{kT} = \frac{1,054 \times 10^{-34} \times (470/1,67 \times 10^{27})^{1/2}}{1,38 \times 10^{-23} \times 300} = 13,5,$$

ta có $P_1 \approx e^{-13,5} = 1,37 \times 10^{-6}$.

(b) Hamiltonian cho chuyển động quay là

$$\hat{H}_r = \frac{1}{2I}\hat{\mathbf{J}}^2,$$

và năng lượng các trạng thái riêng là

$$E_r^{(J)} = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1), \; J = 0, 1, 2, \dots .$$

Bởi vì số phân tử ở trạng thái chuyển động quay J là tỉ lệ với $(2J + 1)\exp\left(-\frac{E_r^{(J)}}{kT}\right)$, vì trạng thái J là suy biến bội $(2J+1)$, $(m_J = -J, -J+1, \cdots J)$, ta có

$$\frac{N(J=0)}{N(J=1)} = \frac{1}{3}\exp\left(\frac{\hbar^2}{IkT}\right).$$

Vì

$$\frac{\hbar^2}{IkT} = \frac{(1,054 \times 10^{-34})^2}{2,3 \times 10^{-47} \times 1,38 \times 10^{-23} \times 300} = 0,117,$$

suy ra $\dfrac{N(J=0)}{N(J=1)} = e^{0.117}/3 = 0,37$.

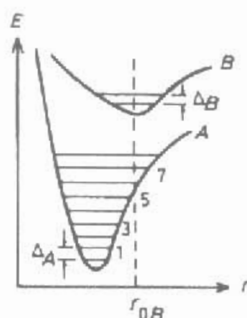
8010

Đường cong diễn tả thế năng đối với trạng thái cơ bản của electron (A) và trạng thái kích thích của electron (B) của một phân tử hai nguyên tử được vẽ trong Hình 8.2. Mỗi trạng thái electron có một dãy mức năng lượng dao động được đánh số bằng số lượng tử ν.

(a) Hiệu năng lượng giữa hai mức dao động thấp nhất được kí hiệu là Δ_A và Δ_B cho các trạng thái electron tương ứng A và B. Hỏi Δ_A lớn hơn hay nhỏ hơn Δ_B? Vì sao?

(b) Một số phân tử ban đầu ở mức dao động thấp nhất của trạng thái electron B, sau đó chuyển dời sang các mức dao động khác nhau của trạng thái electron A bằng cách phát ra các bức xạ. Mức dao động nào của trạng thái electron A có triển vọng tụ tập nhiều nhất sau các chuyển dời đó? Giải thích tại sao.

(*Wisconsin*)



Hình 8.2

Lời giải:

(a) Độ cứng là $K = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial r^2}\right)\Big|_{r=r_0}$, trong đó $r_0$là vị trí cân bằng. Ta có thể nhìn thấy từ Hình 8.2 rằng $K_A > K_B$. Các mức năng lượng dao động được cho bằng

$$E^{(n)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad \omega = \sqrt{\frac{K}{\mu}}.$$

Do đó

$$\Delta_A \approx h\sqrt{\frac{K_A}{\mu}}, \ \Delta_B \approx h\sqrt{\frac{K_B}{\mu}},$$

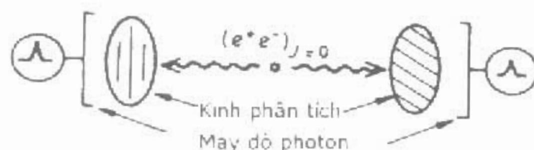
và như vậy $\Delta_A > \Delta_B$.

(b) Electron chuyển động nhanh hơn so với dao động của hạt nhân. Khi một electron chuyển dời sang một trạng thái khác, khoảng cách giữa các hạt nhân dao động có thể coi như thực sự không đổi. Do đó, xác suất để một electron chuyển dời sang các mức khác nhau được xác định bằng xác suất phân bố electron ban đầu. Vì các phân tử ban đầu ở trạng thái cơ bản của các mức dao động, xác suất để electron ở vị trí cân bằng $r = r_{0B}$ là lớn nhất. Khi đó, từ Hình 8.2, ta thấy rằng, mức dao động $\nu \approx 5$ của A là có triển vọng bị chiếm chỗ lớn nhất.

8011

Positroni tuyến phân rã bằng cách phát ra hai photon phân cực vuông góc với nhau. Một thí nghiệm được thiết lập với hai máy dò photon đặt phía sau kính phân tích, như được vẽ trong Hình 8.3. Mỗi kính phân tích có một trục ưu tiên sao cho ánh sáng phân cực theo phương đó được truyền qua hoàn toàn, trong khi ánh sáng phân cực theo phương vuông góc bị hấp thụ hoàn toàn. Trục của các kính phân tích được đặt vuông góc với nhau. Khi nhiều sự kiện được quan sát, hãy tính tỉ số giữa số sự kiện cả hai máy dò đều ghi nhận được photon và số sự kiện mà chỉ một máy dò ghi nhận được một photon.

(*MIT*)



Hình 8.3

Lời giải:

Giả sử positroni ban đầu ở trạng thái đứng yên. Sau khi hai photon chuyển động theo hai chiều ngược nhau do bảo toàn xung lượng và tiến tới các kính phân tích tương ứng vào cùng một thời điểm. Giả sử tiếp theo rằng, góc khối của các máy dò là rất nhỏ. Khi đó, phương của các photon đến được các kính

phân tích phải gần như vuông góc với các kính này. Như vậy, hướng phân cực của những photon này là song song với các kính phân tích.

Kí hiệu θ là góc giữa phương của một photon với phương truyền qua của kính phân tích mà nó tiến đến. Xác suất để nó có thể đi qua kính phân tích là $\cos^2\theta$. Xét photon thứ hai được sinh ra trong chính phân rã này. Do nó có phân cực vuông góc với photon đầu, góc giữa phương phân cực của nó và phương truyền qua cửa kính phân tích thứ hai, vốn vuông góc với phương truyền qua của kính phân tích thứ nhất, cũng là θ. Do đó, xác suất để hai máy dò ghi nhận được sự truyền qua của một photon là

$$P_1 \propto \Omega \left[\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \cos^2\theta(1-\cos^2\theta)\,d\theta + \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}(1-\cos^2\theta)\cos^2\theta d\theta\right]$$
$$= \frac{\Omega}{4},$$

trong đó Ω là góc khối được tương ứng bởi máy dò, và xác suất để cả hai máy dò đều ghi nhận sự truyền qua của photon là

$$P_2 \propto \Omega \left[\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \cos^2\,\theta\cos^2\theta\,d\theta\right] = \frac{3\Omega}{8}.$$

Do đó, tỉ số giữa số sự kiện mà hai máy dò ghi nhận được photon với số sự kiện mà chỉ một máy dò ghi nhận được tại một thời điểm cho trước là

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{3}{8} \div \frac{1}{4} = \frac{3}{2}.$$

8012

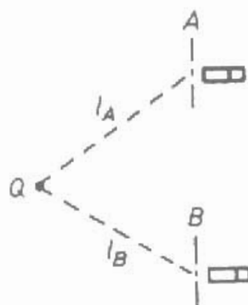
Một nguồn điểm Q phát ra ánh sáng kết hợp đẳng hướng ở hai tần số ω và $\omega + \Delta\omega$ với cùng công suất I (J/s) ở cả hai tần số. Hai máy dò A và B mỗi máy có một diện tích nhạy (nhỏ) s, có khả năng đáp ứng từng photon riêng lẻ, được đặt ở khoảng cách l_A và l_B so với Q, như trong Hình 8.4. Sau đây, ta sẽ lấy $\Delta\omega/\omega \ll 1$ và giả sử thí nghiệm được tiến hành trong chân không.

(a) Hãy tính tốc độ đếm photon (photon/giây) ở A và B riêng rẽ như là hàm số của thời gian. Coi thang đo thời gian $\gg 1/\omega$.

(b) Nếu bây giờ những xung ra từ A và B được đưa vào một mạch trùng phùng với độ phân giải thời gian là τ, tính tốc độ đếm trùng phùng trung bình

theo thời gian. Giả sử rằng $\tau \ll 1/\Delta\omega$ và nhớ lại rằng, một mạch trùng phùng sẽ tạo được xung ra nếu hai xung vào mạch này trong phạm vi một khoảng thời gian là τ.

(*CUS*)



Hình 8.4

Lời giải:

(a) Hàm sóng của một photon ở A là

$$\psi_A(l_A, t) = C_1 \left[e^{i\omega\left(\frac{l_A}{c} - t\right)} + e^{i(\omega+\Delta\omega)\left(\frac{l_A}{c} - t\right)} \right],$$

trong đó C_1 là thực và do đó, xác suất tìm thấy một photon ở A trong một đơn vị thời gian là

$$\begin{aligned} P_A &= \psi_1^* \psi_1 \\ &= C_1^2 \left\{ 2 + 2\cos\left[\Delta\omega \left(\frac{l_A}{c} - t \right) \right] \right\} \\ &= 4C_1^2 \cos^2\left[\frac{\Delta\omega}{2} (l_A/c - t) \right]. \end{aligned}$$

Nếu chỉ có một tần số duy nhất, $P_A = C_1^2$. Vì mỗi photon có năng lượng $\hbar\omega$, số photon đến A trong một giây là

$$\frac{s}{4\pi l_A^2} \cdot \frac{I}{\hbar\omega}.$$

Do đó

$$C^2 = \frac{l}{4\pi l_A^2 \hbar\omega},$$

và

$$P_A = \frac{I}{\pi l_A^2 \hbar\omega} \cos^2 \left[\frac{\Delta\omega}{2}(l_A/c - t)\right] .$$

Tương tự, ta có

$$P_B = 4C_2^2 \cos^2 \left[\frac{\Delta\omega}{2}(l_A/c - t)\right] ,$$

trong đó

$$C_2^2 = \frac{I}{4\pi l_B^2 \hbar\omega} .$$

(b) Trong thời gian phân giải trùng phùng τ, tốc độ đếm trùng phùng trung bình theo thời gian

$$\begin{aligned}
P &= \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} dt \int_{-\tau}^{\tau} P_A(t) P_B(t+x) dx \\
&= \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} dt \int_{-\tau}^{\tau} 4C^4 [1 + \cos\Delta\omega(l_A/c - t)] \\
&\quad \times \left[1 + \cos\Delta\omega\left(\frac{l_B}{c} - t - x\right)\right] dx \\
&= \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} 4C^4 \cdot \{1 + \cos[(l_A/c - t)\Delta\omega]\} \\
&\quad \times \left\{2\tau + 2\tau \cos\left[\Delta\omega\left(\frac{l_B}{c} - t\right)\right]\right\} dt ,
\end{aligned}$$

trong đó

$$C^4 = \frac{I^2 s^2}{16\pi^2 l_B^2 l_A^2 \hbar^2\omega^2} = C_1^2 C_2^2 ,$$

Vì

$$\begin{aligned}
\int_{-\tau}^{\tau} \cos[\Delta\omega(l_B/c - t - x)]\, dx &= \frac{1}{\Delta\omega} 2\sin(\tau\Delta\omega) \cos\left[\left(\frac{l_B}{c} - t\right)\Delta\omega\right] \\
&\approx 2\tau \cos[\Delta\omega(l_B/c - t)] .
\end{aligned}$$

Do đó

$$P = 8\tau C^4 \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} \{1 + \cos[(l_A/c - t)\Delta\omega]\}$$

$$\times \left\{1+\cos\left[\left(\frac{l_B}{c}-t\right)\Delta\omega\right]\right\} dt$$

$$= 8\tau C^4 \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T}\int_{-T}^{T}\left\{1+\cos\left[\left(\frac{l_B}{c}-t\right)\Delta\omega\right]\right.$$

$$\left. +\cos\left[\left(\frac{l_A}{c}-t\right)\Delta\omega\right]+\cos\left[\left(\frac{l_A}{c}-t\right)\Delta\omega\right]\cos\left[\left(\frac{l_B}{c}-t\right)\Delta\omega\right]\right\} dt$$

$$= 8\tau C^4 \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T}\int_{-T}^{T}\left\{1+\frac{1}{2}\cos\left[\frac{\Delta\omega}{c}(l_A-l_B)\right]\right.$$

$$+\cos\left[\left(\frac{l_A+l_B}{2c}-t\right)\Delta\omega\right]\cos\left[\left(\frac{l_A-l_B}{2c}\right)\Delta\omega\right]$$

$$\left.+\frac{1}{2}\cos\left[\left(\frac{l_A+l_B}{c}-2t\right)\Delta\omega\right]\right\} dt$$

$$= 8\tau C^4 \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T}\left\{2T+\frac{2T}{2}\cos\left[\left(\frac{l_A-l_B}{c}\right)\Delta\omega\right]\right\}$$

$$= 8\tau C^4\left\{1+\frac{1}{2}\cos\left[\frac{\Delta\omega(l_A-l_B)}{c}\right]\right\}$$

$$= \frac{\tau I^2 s^2}{2\pi^2 l_B^2 l_A^2 \hbar^2\omega^2}\left\{1+\frac{1}{2}\cos\left[\frac{\Delta\omega}{c}(l_A-l_B)\right]\right\}.$$

8013

Một hệ tích điện dao động (gần) cổ điển bị mất năng lượng do phát ra bức xạ điện từ. Ở năng lượng E, nó phát xạ (và dao động) với tần số $\nu(E) = \alpha(E/E_0)^{-\beta}$, trong đó α, β và E_0 là hằng số dương. Hãy tính các mức năng lượng lượng tử E_n (của hệ) với n lớn.

(Berkeley)

Lời giải:

Theo nguyên lý tương ứng của Bohr, tần số lượng tử sẽ gần với tần số cổ điển khi $n \gg 1$, nghĩa là $\nu_{qu} \to \nu_{cl}$ khi $n \to \infty$. Vì

$$\nu_{qu} = \tau\frac{\partial H}{\partial J},$$

trong đó $J = nh$, $\tau = n - m$, và m, $n \gg 1$. Ta có, với $\tau = 1$,

$$h\nu = \frac{dE}{dn} = h\alpha(E/E_0)^{-\beta},$$

hay

$$E^\beta dE = h\alpha E_0^\beta dn\,.$$

Lấy tích phân

$$\int_0^{E_n} E^\beta dE = h\alpha E_0^\beta \int_0^n dn\,,$$

ta có

$$E_n = \left[h\alpha(\beta+1)nE_0^\beta\right]^{\frac{1}{1+\beta}}\,.$$

8014

Một hạt không có spin khối lượng m và điện tích q buộc phải chuyển động trên một hình tròn bán kính R như được vẽ trong Hình 8.5. Hãy tìm các mức năng lượng cho phép (với sai khác một hằng số cộng tính chung) cho mỗi một trường hợp sau đây:

(a) Chuyển động của hạt là phi tương đối tính.

(b) Có một từ trường đều **B** vuông góc với mặt phẳng của đường tròn.

(c) Vẫn với từ thông trước đây đi qua đường tròn, nhưng bây giờ là nằm trong lòng một cuộn cảm bán kính $b(b < R)$.

(d) Có một điện trường rất mạnh **F** trong mặt phẳng đường tròn ($q|\mathbf{F}| \gg \hbar^2/mR^2$).

(e) **F** và **B** bằng không, nhưng chuyển động của electron quanh đường tròn là hoàn toàn tương đối tính.

(f) Đường tròn được thay bằng một elip với cùng chu vi nhưng diện tích bằng một nửa.

(CUS)

Lời giải:

(a) Gọi xung lượng của hạt là p. Điều kiện lượng tử hóa

$$p \cdot 2\pi R = nh$$

sẽ cho

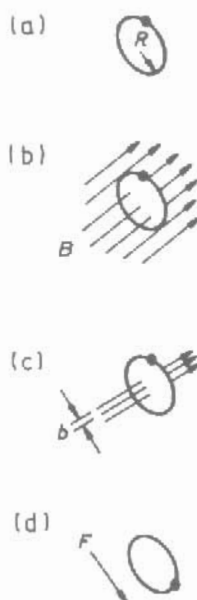
$$p = \frac{n\hbar}{R}$$

và do đó

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\hbar}{R}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\,n^2\,,$$

trong đó

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots .$$



Hình 8.5

(b) Lấy hệ trục tọa độ với gốc ở tâm của đường tròn và trục z dọc theo phương của **B**. Khi đó, thế vectơ ở một điểm trên đường tròn là

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\,BR\mathbf{e}_\varphi\,.$$

Phương trình Schrödinger

$$\hat{H}\psi = E\psi\,,$$

trong đó

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2\,,$$

có thể viết dưới dạng

$$\frac{1}{2m}\left(-\frac{i\hbar}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{q}{c}\cdot\frac{1}{2}BR\right)^2\psi(\varphi) = E\psi(\varphi)\,.$$

Nghiệm của nó là $\psi(\varphi) = Ce^{in\varphi}$, điều kiện đơn trị $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$ đòi hỏi $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. Thay nghiệm vào phương trình, ta có

$$E = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\hbar}{R} - \frac{q}{2c}BR\right)^2 .$$

(c) Khi từ thông bị buộc phải ở bên trong cuộn cảm bán kính b bao quanh bởi đường tròn đã cho, từ trường sẽ bằng không trên đường tròn đó. Bởi vì $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B} = 0$, nên A có thể lấy là hằng số và bằng $\frac{1}{2}BR$ khi $b \to R$. Khi đó

$$A = \frac{1}{2}\frac{B\pi R^2}{\pi R} = \frac{\phi}{2\pi R} .$$

Vì ϕ vẫn như trước, nên các mức năng lượng vẫn như câu (b)

(d) Lấy trục x song song với $\mathbf{F}$. Khi đó

$$\mathbf{F} = F(\cos\varphi, -\sin\varphi),\ d\mathbf{r} = (0,\ Rd\varphi) ,$$

và do đó

$$V = -\int q\mathbf{F}\cdot d\mathbf{r} = qFR\int \sin\varphi d\varphi = -qFR\cos\varphi .$$

Như vậy, Hamiltonian là

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{R^2}\frac{d^2}{d\varphi^2} - qFR\cos\varphi .$$

Bởi vì điện trường $\mathbf{F}$ là rất mạnh, xác suất để hạt chuyển động gần $\varphi \sim 0$ là rất lớn. Do đó, ta có thể lấy gần đúng

$$\cos\varphi = 1 - \frac{1}{2}\varphi^2 + O(\varphi^4) \approx 1 - \frac{\varphi^2}{2}$$

và thu được

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{d^2}{d\varphi^2} - qFR\left(1 - \frac{1}{2}\varphi^2\right) ,$$

hay

$$\hat{H} + qFR = -\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{1}{2}qFR\varphi^2 ,$$

và nó có dạng Hamiltonian của một dao động tử điều hòa khối lượng $M = mR^2$ với tần số ω được cho bằng $M\omega^2 = qFR$, giá trị riêng của nó là

$$E_n + qFR = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega ,$$

hay

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega - qFR \,,$$

với

$$\omega = \sqrt{\frac{qFR}{M}} = \sqrt{\frac{qF}{mR}} \,, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \,.$$

Như vậy

$$E_n = -qFR + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{qF}{mR}} \,.$$

(e) Điều kiện lượng tử hóa sẽ cho $p \cdot 2\pi R = nh$, hay $p = n\hbar/R$.

Nếu hạt là hoàn toàn tương đối tính

$$E = pc = \frac{n\hbar c}{R} \,, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \,.$$

(f) Điều kiện lượng tử hóa cho ta

$$p = n\hbar/R \,,$$

và do đó

$$E = pc = \frac{n\hbar c}{R} \,,$$

như khi quỹ đạo là tròn.

8015

Xét tán xạ của một hạt gây ra bởi một mạng đều đặn với cơ sở là **a**, **b**, **c**. Tương tác với mạng có thể được viết dưới dạng $V = \sum_j V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|)$ trong đó $V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|)$ là thế của mỗi nguyên tử và nó là đối xứng cầu đối với các điểm xung quanh điểm mạng của nguyên tử. Bằng cách sử dụng gần đúng Born, hãy chỉ ra rằng, điều kiện để có tán xạ khác không là định luật Bragg phải được thỏa mãn. (*Berkeley*)

Lời giải:

Gần đúng Born cho ta

$$f(\theta) = -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \sum_j \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\cdot\mathbf{r}} V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) d\mathbf{r}'$$

$$= -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \sum_j e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\cdot\mathbf{r}_j} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\cdot\mathbf{r}'} V(|\mathbf{r}'|) d\mathbf{r}' \,,$$

trong đó $\mathbf{r} = \mathbf{r}_j + \mathbf{r}'$. Xét tổng $\sum_j e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\cdot\mathbf{r}_j}$.

Vì tổng được lấy theo tất cả các điểm của mạng, cho nên, để tổng khác không, cần phải có $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}_j = 2n\pi$.

Như vậy, điều kiện để có tán xạ khác không là

$$\mathbf{r}_j \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = 2n\pi \ .$$

thỏa mãn cho tất cả các vectơ của mạng $\mathbf{r}_j$, từ đó

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = 2\pi l_1 \ ,$$

$$\mathbf{b} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = 2\pi l_2 \ ,$$

$$\mathbf{c} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = 2\pi l_3 \ .$$

l_1, l_2, l_3 là các số nguyên. Đây chính là định luật Bragg.

8016

Để tìm hàm riêng gần đúng của Hamiltonian H ta có thể dùng phương pháp biến phân với hàm thử có dạng $\psi = \sum_{k=1}^{n} a_k\phi_k$ (trong đó ϕ_k là các hàm cho trước, và a_k là các tham số biến phân). Hãy chứng tỏ rằng sẽ tìm được n nghiệm ψ_α với năng lượng $\varepsilon_\alpha = \langle\psi_\alpha|H|\psi_\alpha\rangle/\langle\psi_\alpha|\psi_\alpha\rangle$, trong đó H là Hamiltonian. Ta sẽ sắp xếp chúng sao cho $\varepsilon_1 \le \varepsilon_2 \le \varepsilon_3 \cdots$. Từ điều kiện Hecmite của Hamiltonian, hãy chỉ ra rằng ψ_α hoặc là tự động hoặc là có thể chọn để thỏa mãn điều kiện $\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}$, $\langle\psi_\alpha|H|\psi_\beta\rangle = \varepsilon_\alpha\delta_{\alpha\beta}$. Biết rằng, có thể chắc chắn tìm được một tổ hợp tuyến tính của ψ_1 và ψ_2 mà nó trực giao với ψ_1, trạng thái cơ sở đúng của H với giá trị riêng E_1, hãy chứng minh rằng $\varepsilon_2 \ge E_2$, trong đó E_2 là năng lượng đúng của trạng thái kích thích đầu tiên.

(Wisconsin)

Lời giải:

Giả sử $\{\phi_k\}$ là một hệ hàm độc lập tuyến tính. Ta có thể giả sử rằng $\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$, vì nếu cần thiết có thể áp dụng quá trình trực giao hóa Schmidt. Khi đó

$$\bar{H} = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\sum\limits_{i,j}^{n} a_i^* a_j \lambda_{ij}}{\sum\limits_{i,j}^{n} a_i^* a_j \delta_{ij}} = \sum_{i,j} x_i^* \lambda_{ij} x_j = X^+ \hat{\lambda} X \ ,$$

trong đó

$$x_i = \frac{a_i}{\sqrt{\sum_j |a_j|^2}}, \quad \lambda_{ij} = \langle\phi_i|H|\phi_j\rangle = \lambda^*_{ji}.$$

Chú ý rằng

$$\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2 = 1.$$

Vì $\hat{\lambda}$ là Hecmite, ta có thể chọn một phép quay $X - \hat{p}Y$, sao cho $\hat{\Lambda} = \hat{p}^+\hat{\lambda}\hat{p} = \hat{p}^{-1}\hat{\lambda}\hat{p}$ là ma trận chéo, với các yếu tố đường chéo $\Lambda_{11} \le \Lambda_{22} \le \Lambda_{33}$. Khi đó

$$\bar{H} = \sum_{i=1}^{n} \Lambda_{ii}|y_i|^2,$$

trong đó y_i thỏa mãn $\sum_{i=1}^{n} |y_i|^2 = 1$.

Áp dụng nguyên lý biến phân

$$0 = \delta\left[\bar{H} - \alpha\left(\sum_i |y_i|^2 - 1\right)\right] = \delta\left[\sum_i(\Lambda_{ii} - \alpha)|y_i|^2 + \alpha\right],$$

trong đó α là nhân tử Lagrange, ta được

$$\sum_i(\Lambda_{ii} - \alpha)|y_i|\delta|y_i| = 0,$$

hay

$$(\Lambda_{ii} - \alpha)|y_i| = 0, \quad (i = 1, 2, \cdots)$$

nghĩa là, $\alpha = \Lambda_{ii}$ hoặc $|y_i| = 0$.

Do đó, nghiệm của phương trình biến phân là

$$\alpha = \Lambda_{ii},\ y_j^{(i)} = \delta_j^i = \delta_{ij}, \quad (i = 1, 2, \cdots, n).$$

Như vậy ta tìm được n nghiệm ψ_α, nghiệm thứ α $y_i^{(\alpha)} = \delta_i^{(\alpha)}$ tương ứng với năng lượng

$$\varepsilon_\alpha = \frac{\langle\psi_\alpha|H|\psi_\alpha\rangle}{\langle\psi_\alpha|\psi_\alpha\rangle} = \sum_i \Lambda_{ii}|y_i^{(\alpha)}|^2 = \Lambda_{\alpha\alpha}$$

với $\varepsilon_1 \le \varepsilon_2 \le \varepsilon_3 \ldots$.

Với $\psi_\alpha = \psi_\alpha[X(Y)]$, ta có

$$\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle = \sum_i a_i^{(\alpha)*} a_i^{(\beta)}$$

$$= \sqrt{\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2 \sum_j |a_j^{(\beta)}|^2} \cdot \sum_i x_i^{(\alpha)*} x_i^{(\beta)}$$

$$= \sqrt{\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2 \sum_j |a_j^{(\beta)}|^2} \cdot \sum_i y_i^{(\alpha)*} y_i^{(\beta)} = \left[\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2\right] \delta_{\alpha\beta} ,$$

$$\langle\psi_\alpha|H|\psi_\beta\rangle = \sum_{i,j} a_i^{(\alpha)*} \lambda_{ij}\, a_j^{(\beta)}$$

$$= \sqrt{\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2 \sum_j |a_j^{(\beta)}|^2} \cdot \sum_{i,j} x_i^{(\alpha)*} \lambda_{ij} x_j^{(\beta)}$$

$$= \sqrt{\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2 \sum_j |a_j^{(\beta)}|^2} \cdot \sum_{i,j} y_i^{(\alpha)*} \Lambda_{ij} y_j^{(\beta)}$$

$$= \left[\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2\right] \varepsilon_\alpha \delta_{\alpha\beta} .$$

Khi đó, bằng cách đặt $\Psi_\alpha = \psi_\alpha / \sqrt{\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2}$, ta có

$$\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}, \ \langle\Psi_\alpha|H|\Psi_\beta\rangle = \varepsilon_\alpha \delta_{\alpha\beta} .$$

Gọi hàm sóng chính xác của trạng thái cơ bản và của trạng thái kích thích đầu tiên của Hamiltonian H là Φ_1 và Φ_2, với năng lượng đúng tương ứng là E_1 và E_2. Khi đó sẽ phải tồn tại hai số μ_1 và μ_2 sao cho $\Phi_1 = \mu_1\Psi_1 + \mu_2\Psi_2$, $|\mu_1|^2 + |\mu_2|^2 = 1$. Từ điều kiện trực giao của Φ_1 và Φ_2, ta có $\Phi_2 = \mu_2^*\Psi_1 - \mu_1^*\Psi_2$, và do đó

$$E_1 = \varepsilon_1|\mu_1|^2 + \varepsilon_2|\mu_2|^2 ,$$

$$E_2 = \varepsilon_1|\mu_2|^2 + \varepsilon_2|\mu_1|^2 = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)|\mu_2|^2 + \varepsilon_2 \le \varepsilon_2 .$$

8017

Hãy tìm giá trị của tham số λ trong hàm thử $\phi(x) = Ae^{-\lambda^2 x^2}$, trong đó A là hằng số chuẩn hóa, và nó sẽ dẫn đến gần đúng tốt nhất cho năng lượng của

trong đó

$$x_i = \frac{a_i}{\sqrt{\sum_j |a_j|^2}}, \quad \lambda_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle = \lambda_{ji}^* .$$

Chú ý rằng

$$\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2 = 1 .$$

Vì $\hat{\lambda}$ là Hecmite, ta có thể chọn một phép quay $X = \hat{p}Y$, sao cho $\hat{\Lambda} = \hat{p}^+ \hat{\lambda} \hat{p} = \hat{p}^{-1} \hat{\lambda} \hat{p}$ là ma trận chéo, với các yếu tố đường chéo $\Lambda_{11} \leq \Lambda_{22} \leq \Lambda_{33}$. Khi đó

$$\bar{H} = \sum_{i=1}^{n} \Lambda_{ii} |y_i|^2 ,$$

trong đó y_i thỏa mãn $\sum_{i=1}^{n} |y_i|^2 = 1$.

Áp dụng nguyên lý biến phân

$$0 = \delta \left[\bar{H} - \alpha \left(\sum_i |y_i|^2 - 1 \right) \right] = \delta \left[\sum_i (\Lambda_{ii} - \alpha) |y_i|^2 + \alpha \right] ,$$

trong đó α là nhân tử Lagrange, ta được

$$\sum_i (\Lambda_{ii} - \alpha) |y_i| \delta |y_i| = 0 ,$$

hay

$$(\Lambda_{ii} - \alpha) |y_i| = 0, \quad (i = 1, 2, \cdots)$$

nghĩa là, $\alpha = \Lambda_{ii}$ hoặc $|y_i| = 0$.

Do đó, nghiệm của phương trình biến phân là

$$\alpha = \Lambda_{ii},\ y_j^{(i)} = \delta_j^i = \delta_{ij}, \quad (i = 1, 2, \cdots, n) .$$

Như vậy ta tìm được n nghiệm ψ_α, nghiệm thứ α $y_i^{(\alpha)} = \delta_i^{(\alpha)}$ tương ứng với năng lượng

$$\varepsilon_\alpha = \frac{\langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle} = \sum_i \Lambda_{ii} |y_i^{(\alpha)}|^2 = \Lambda_{\alpha\alpha}$$

với $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \varepsilon_3 \ldots$

Với $\psi_\alpha = \psi_\alpha[X(Y)]$, ta có

$$\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle = \sum_i a_i^{(\alpha)*} a_i^{(\beta)}$$

$$= \sqrt{\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2 \sum_j |a_j^{(\beta)}|^2} \cdot \sum_i x_i^{(\alpha)*} x_i^{(\beta)}$$

$$= \sqrt{\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2 \sum_j |a_j^{(\beta)}|^2} \cdot \sum_i y_i^{(\alpha)*} y_i^{(\beta)} = \left[\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2\right] \delta_{\alpha\beta} ,$$

$$\langle\psi_\alpha|H|\psi_\beta\rangle = \sum_{i,j} a_i^{(\alpha)*} \lambda_{ij}\, a_j^{(\beta)}$$

$$= \sqrt{\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2 \sum_j |a_j^{(\beta)}|^2} \cdot \sum_{i,j} x_i^{(\alpha)*} \lambda_{ij} x_j^{(\beta)}$$

$$= \sqrt{\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2 \sum_j |a_j^{(\beta)}|^2} \cdot \sum_{i,j} y_i^{(\alpha)*} \Lambda_{ij} y_j^{(\beta)}$$

$$= \left[\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2\right] \varepsilon_\alpha \delta_{\alpha\beta} .$$

Khi đó, bằng cách đặt $\Psi_\alpha = \psi_\alpha / \sqrt{\sum_j |a_j^{(\alpha)}|^2}$, ta có

$$\langle\Psi_\alpha|\Psi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}, \ \langle\Psi_\alpha|H|\Psi_\beta\rangle = \varepsilon_\alpha \delta_{\alpha\beta} .$$

Gọi hàm sóng chính xác của trạng thái cơ bản và của trạng thái kích thích đầu tiên của Hamiltonian H là Φ_1 và Φ_2, với năng lượng đúng tương ứng là E_1 và E_2. Khi đó sẽ phải tồn tại hai số μ_1 và μ_2 sao cho $\Phi_1 = \mu_1\Psi_1 + \mu_2\Psi_2$, $|\mu_1|^2 + |\mu_2|^2 = 1$. Từ điều kiện trực giao của Φ_1 và Φ_2, ta có $\Phi_2 = \mu_2^*\Psi_1 - \mu_1^*\Psi_2$, và do đó

$$E_1 = \varepsilon_1|\mu_1|^2 + \varepsilon_2|\mu_2|^2 ,$$

$$E_2 = \varepsilon_1|\mu_2|^2 + \varepsilon_2|\mu_1|^2 = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)|\mu_2|^2 + \varepsilon_2 \le \varepsilon_2 .$$

8017

Hãy tìm giá trị của tham số λ trong hàm thử $\phi(x) = Ae^{-\lambda^2 x^2}$, trong đó A là hằng số chuẩn hóa, và nó sẽ dẫn đến gần đúng tốt nhất cho năng lượng của

trạng thái cơ bản của Hamiltonian một hạt $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + bx^4$, trong đó b là một hằng số. Có thể sử dụng những tích phân sau đây

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}},$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-ax^2}dx = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^5}}.$$

(*Wisconsin*)

Lời giải:

Sử dụng hàm thử $\phi = Ae^{-\lambda^2 x^2}$, xét tích phân

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)\phi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-2\lambda^2 x^2}dx = A^2\sqrt{\frac{\pi}{2\lambda^2}} = 1,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)H\phi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-\lambda^2 x^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + bx^4\right)e^{-\lambda^2 x^2}dx$$

$$= A^2\int_{-\infty}^{\infty}\left[-\frac{\hbar^2}{m}(2\lambda^4 x^2 - \lambda^2) + bx^4\right]e^{-2\lambda^2 x^2}dx$$
$$= A^2\left[-\frac{\hbar^2}{m}\left(2\lambda^4\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{(2\lambda^2)^3}} - \lambda^2\sqrt{\frac{\pi}{2\lambda^2}}\right)\right.$$
$$\left. + b\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{(2\lambda^2)^5}}\right]$$
$$= A^2\left[\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{m}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\lambda + b\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{3}{16\lambda^5}\right],$$

và thu được

$$\langle H\rangle = \frac{\int\phi^* H\phi dx}{\int\phi^*\phi dx} = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar^2}{m}\lambda^2 + b\frac{3}{8\lambda^4}\right).$$

Vì $\frac{1}{3}(a+b+c) \geq (abc)^{1/3}$ đối với các số dương a, b, c, ta có

$$\langle H\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m} + \frac{\hbar^2\lambda^2}{2m} + \frac{3b}{8\lambda^4}\right) \geq \frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^4}{4m^2}\cdot\frac{3b}{8}\right)^{\frac{1}{3}}.$$

Do đó, gần đúng tốt nhất cho năng lượng của trạng thái cơ bản là

$$\langle H\rangle_{\min} = \frac{3}{4}\left(\frac{3}{4}\right)^{\frac{1}{3}}\left(\frac{b\hbar^4}{m^2}\right)^{\frac{1}{3}}.$$

8018

Xét các mức năng lượng của thế $V = g|x|$.

(a) Bằng cách phân tích thứ nguyên, nêu lý do để một giá trị riêng nói chung, phụ thuộc vào tham số m = khối lượng, $\hbar$, g.

(b) Với một hàm thử đơn giản

$$V = c\theta(x+a)\theta(a-x)\left(1 - \frac{|x|}{a}\right)$$

hãy cho (đến kết quả cuối cùng tốt nhất) một ước lượng bằng phương pháp biến phân cho năng lượng của trạng thái cơ bản. Ở đây c, a là các tham số biến thiên, $\theta(x) = 0$ đối với $x < 0$, $\theta(x) = 1$ đối với $x > 0$.

(c) Vì sao hàm thử $\psi = c\theta(x+a)\theta(a-x)$ không phải là hàm tốt?

(d) Miêu tả sơ bộ (không dùng phương trình) cách thức để có ước lượng biến phân cho năng lượng trạng thái kích thích đầu tiên.

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Phương trình Schrödinger

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + g|x|\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

có thể viết thành

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - g|x|)\right]\psi(x) = 0\,.$$

Vì

$$\left[\frac{mE}{\hbar^2}\right] = L^{-2},\ \left[\frac{mg}{\hbar^2}\right] = L^{-3}\,,$$

ta có

$$\left[\left(\frac{mE}{\hbar^2}\right)^3\right] = \left[\left(\frac{mg}{\hbar^2}\right)^2\right]\,,$$

hay

$$[E] = \left[\left(\frac{\hbar^2}{m}g^2\right)^{1/3}\right]\,.$$

Do đó, giá trị riêng có dạng

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{m}g^2\right)^{1/3} f(n)\,,$$

trong đó $f(n)$ là một hàm của số nguyên dương n.

(b) Đầu tiên ta chuẩn hóa hàm sóng thử. Vì

$$1 = \int \psi^*(x)\psi(x)dx = |c|^2 \int \left[\theta(x+a)\theta(a-x)\left(1-\frac{|x|}{a}\right)\right]^2 dx$$

$$= |c|^2 \int_{-a}^{a} \left(1-\frac{|x|}{a}\right)^2 dx = \frac{2a}{3}|c|^2 ,$$

ta có

$$|c|^2 = \frac{3}{2a} .$$

Khi đó, giá trị trung bình của Hamiltonian

$$\bar{H} = \int \psi^* H\psi dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)dx + g\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)|x|\psi(x)dx .$$

Vì

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)|x|\psi(x)dx = |c|^2\left\{-\int_{-a}^{0} x\left(1+\frac{x}{a}\right)^2 dx + \int_{0}^{a} x\left(1-\frac{x}{a}\right)^2 dx\right\}$$

$$= a^2|c|^2/6 = a/4 ,$$

$$\frac{d}{dx}\psi(x) = c\delta(x+a)\theta(a-x)\left(1-\frac{|x|}{a}\right)$$

$$- c\theta(x+a)\delta(x-a)\left(1-\frac{|x|}{a}\right)$$

$$+ c\theta(x+a)\theta(x-a)\left(-\frac{|x|}{x}\frac{1}{a}\right) ,$$

ta có

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi'(x)\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)\,dx = \psi(x)\frac{d}{dx}\psi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{d\psi}{dx}\right)^2 dx$$

$$= -\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{d\psi}{dx}\right)^2 dx$$

$$= -|c|^2\int_{-a}^{a}\left(-\frac{|x|}{xa}\right)^2 dx$$

$$= -2|c|^2/a = -3/a^2 ,$$

và do đó

$$\bar{H} = \frac{3\hbar^2}{2ma^2} + \frac{a}{4} g .$$

Đối với giá trị cực tiểu, đặt

$$\frac{\delta \bar{H}}{\delta a} = -\frac{3\hbar^2}{ma^3} + \frac{g}{4} = 0 ,$$

ta được

$$a = \left(\frac{12\hbar^2}{gm}\right)^{1/3} .$$

Do đó, một ước lượng cho năng lượng trạng thái cơ bản là

$$\bar{H} = \frac{3\hbar^2}{2m}\left(\frac{gm}{12\hbar^2}\right)^{2/3} + \frac{g}{4}\left(\frac{12\hbar^2}{gm}\right)^{1/3} = \frac{3}{4}\left(\frac{3\hbar^2 g^2}{2m}\right)^{1/3} .$$

(c) Nếu ta sử dụng hàm thử $\psi = c\theta(x+a)\theta(a-x)$ và lặp lại những tính toán trên đây, ta sẽ thu được

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\mathbf{x})|x|\psi dx = a^2 c^2 ,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{d^2}{dx^2} \psi dx = 0 ,$$

$$1 = \int_{-a}^{a} \psi^2 dx = 2ac^2 ,$$

và do đó

$$\bar{H} = \frac{ga^2c^2}{2ac^2} = \frac{ga}{2} .$$

Vì

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial a} = \frac{g}{2} \neq 0 ,$$

$\bar{H}$ hiển nhiên không có điểm cực trị. Như vậy, hàm thử này không phải là hàm thử tốt.

(d) Trước hết, ta chọn hàm sóng thử cho trạng thái kích thích đầu tiên. Nó phải trực giao với hàm thử của trạng thái cơ bản. Khi đó, vẫn sử dụng phương

pháp trước đây, ta sẽ thu được một ước lượng cho năng lượng trạng thái kích thích đầu tiên.

8019

(Sử dụng phương pháp phi tương đối tính để giải bài toán này)

Hầu hết các boson có thể được mô tả như trạng thái liên kết của cặp quark - phản quark ($q\bar{q}$). Xét trường hợp của một meson, được tạo nên từ cặp ($q\bar{q}$) trong trạng thái s. Gọi m_q là khối lượng của quark.

Giả sử thế liên kết q với $\bar{q}$ có thể viết là $V = \frac{A}{r} + Br$ với $A < 0$ và $B > 0$. Yêu cầu bạn hãy tìm một gần đúng khả dĩ cho năng lượng trạng thái cơ bản của hệ theo A, B, m_q và $\hbar$. Đáng tiếc, với một lớp các hàm thử thích hợp cho bài toán này, chúng lại thường dẫn đến phải giải phương trình bậc ba. Nếu điều này xảy ra với bạn, và bạn không muốn mất thì giờ để cố giải phương trình bậc ba ấy, bạn có thể thực hiện việc giải phương trình cho trường hợp $A = 0$ (sẽ không mất điểm). Hãy viết đáp số của câu hỏi cuối cùng dưới dạng tích của một hằng số bằng số, mà bạn phải tính ra cụ thể, với một hàm chứa B, m_q và $\hbar$. *(Berkeley)*

Lời giải:

Phương pháp I

Chọn hàm thử là hàm sóng trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro.

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{-r/a}$$

và tính

$$\begin{aligned}\bar{H} &= \langle\psi|H|\psi\rangle/\langle\psi|\psi\rangle \\ &= \int_0^\infty drr^2e^{-r/a}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right. \\ &\quad \left. + Ar^{-1} + Br\right]e^{-r/a}\Big/\int_0^\infty drr^2e^{-2r/a} \\ &= \frac{3Ba}{2} + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{a^2} + \frac{A}{a},\end{aligned}$$

trong đó $\mu = \frac{m_q}{2}$ là khối lượng rút gọn của hệ $q\bar{q}$. Tính biến phân để tìm cực

tiểu $\bar{H}$ bằng cách đặt $\frac{\delta\bar{H}}{\delta a} = 0$, nó sẽ cho

$$\frac{3}{2}Ba^3 - Aa - \frac{\hbar^2}{\mu} = 0\,.$$

Khi $A = 0$, nghiệm là $a = \left(\frac{2\hbar^2}{3B\mu}\right)^{1/3}$. Do đó, năng lượng trạng thái cơ bản sẽ là

$$E_g = \bar{H} = \frac{3}{4}\left(\frac{36B^2\hbar^2}{m_q}\right)^{1/3} = 2,48\left(\frac{B^2\hbar^2}{m_q}\right)^{1/3}\,.$$

Phương pháp II

Một cách ước lượng khác năng lượng trạng thái cơ bản là sử dụng nguyên lý bất định. Xét

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{A}{r} + Br\,.$$

Vì nguyên lý bất định đòi hỏi

$$p_x x \geq \frac{\hbar}{2},\ p_y y \geq \frac{\hbar}{2},\ p_z z \geq \frac{\hbar}{2}\,,$$

và ta lấy dấu bằng cho trạng thái cơ bản. Khi đó thu được

$$H = \frac{\hbar^2}{8\mu x^2} + \frac{\hbar^2}{8\mu y^2} + \frac{\hbar^2}{8\mu z^2} + \frac{A}{r} + Br\,.$$

Cực tiểu hóa H, đặt

$$\frac{\partial H}{\partial x} = 0\,,$$

nghĩa là,

$$\frac{-\hbar^2}{4\mu x^2} - \frac{Ax}{r^3} + \frac{Bx}{r} = 0\,.$$

Vì H là đối xứng với x, y, z, khi nó đạt giá trị tối ưu, ta có $x = y = z$, hay $r = \sqrt{3}x$, và phương trình ở trên trở thành

$$-\frac{\hbar^2}{4\mu x^3} - \frac{A}{3\sqrt{3}x^2} + \frac{B}{\sqrt{3}} = 0\,.$$

Đặt $A = 0$ sẽ thu được

$$x = 3^{\frac{1}{6}}\left(\frac{\hbar^2}{4\mu B}\right)^{1/3}, \quad \text{hay} \quad r = \left(\frac{9\hbar^2}{4\mu B}\right)^{1/3},$$

Do đó

$$\bar{H} = \frac{3\hbar^2}{8\mu x^2} + Br = 2\left(\frac{9}{2}\,\frac{\hbar^2 B^2}{m_q}\right)^{\frac{1}{3}} = 3,30\,\left(\frac{\hbar^2 B^2}{m_q}\right)^{1/3} .$$

8020

Một hố thế hút một chiều thỏa mãn

$$V(x) < 0, \int_{-\infty}^{+\infty} V(x)dx \text{ hữu hạn}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\,V(x)dx \text{ hữu hạn} .$$

(a) Sử dụng hàm thử có dạng $e^{-\beta x^2/2}$, hãy chứng minh rằng, hố thế có ít nhất một trạng thái liên kết.

(b) Giả sử rằng thế là khá yếu ($\int_{-\infty}^{+\infty} V(x)dx$, $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 V(x)\,dx$ cả hai là nhỏ), hãy tìm giới hạn trên tốt nhất (cho năng lượng) đối với lớp các hàm thử đó.

(c) Bằng một phát biểu không thứ nguyên, hãy nói chính xác "nhỏ" trong câu (b) có nghĩa là gì? (*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Hàm thử đã cho là hàm sóng trạng thái cơ bản của một dao động tử điều hòa một chiều. Ta sẽ dùng hàm chuẩn hóa

$$\psi(x) = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta x^2/2} ,$$

trong đó $\beta = \frac{m\omega}{\hbar}$. Hamiltonian có thể viết dưới dạng

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\,m\omega^2 x^2 + V(x) - \frac{1}{2}\,m\omega^2 x^2 = H_0 + V(x) - \frac{1}{2}\,m\omega^2 x^2 .$$

Vì

$$\langle\psi|H_0|\psi\rangle = \frac{1}{2}\,\hbar\omega ,$$

ta có

$$\bar{H} = \langle\psi|H|\psi\rangle = \frac{1}{2}\,\hbar\omega + \langle\psi|V(x) - \frac{1}{2}\,m\omega^2 x^2|\psi\rangle$$

$$= \frac{1}{4}\,\hbar\omega + \langle\psi|V(x)|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4m}\,\beta + \langle\psi|V(x)|\psi\rangle ,$$

và

$$\frac{\delta\bar{H}}{\delta\beta} = \frac{\hbar^2}{4m} + \frac{1}{2\beta}\langle\psi|V(x)|\psi\rangle - \langle\psi|x^2V(x)|\psi\rangle .$$

Bởi vì khi $\beta \to 0$,

$$\frac{1}{2\beta}\langle\psi|V|\psi\rangle = \frac{1}{2\beta}\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} V dx \to -\infty$$

và do V âm,

$$\langle\psi|x^2V|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x^2 V dx \to 0 ,$$

ta có $\frac{\delta\bar{H}}{\delta\beta} \to -\infty$ khi $\beta \to 0$. Khi $\beta \to \infty$, $\frac{\delta\bar{H}}{\delta\beta} \to \frac{\hbar^2}{4m} > 0$. Do đó $\frac{\delta\bar{H}}{\delta\beta} = 0$ ít nhất đối với một số dương nào đó β, chẳng hạn β_0. Như vậy, hàm thử là thích hợp và năng lượng cho trạng thái tương ứng là

$$\begin{aligned}\bar{E} = \bar{H}(\beta_0) &= \frac{\hbar^2\beta_0}{4m} + 2\beta_0\left(-\frac{\hbar^2}{4m} + \langle\psi|x^2V(x)|\psi\rangle\right) \\ &= -\frac{\hbar^2\beta_0}{4m} + 2\beta_0\langle\psi|x^2V(x)|\psi\rangle < 0 .\end{aligned}$$

Do đó, hệ có ít nhất một trạng thái liên kết. Chú ý rằng, ta đã dùng tính chất $\left(\frac{\delta\bar{H}}{\delta\beta}\right)_{\beta_0} = 0$, mà khi $\beta = \beta_0$, nó sẽ cho

$$\langle\psi|V(x)|\psi\rangle = 2\beta_0\left(-\frac{\hbar^2}{4m} + \langle\psi|x^2V(x)|\psi\rangle\right) .$$

(b) (c) Đặt $\int_{-\infty}^{\infty} V(x)dx = A$, $\int_{-\infty}^{\infty} x^2V(x)dx = B$. Đòi hỏi A và B là nhỏ, nghĩa là thế $V(x)$ có thể có giá trị lớn chỉ trong một miền nhỏ của $|x|$. Hơn nữa, đối với $|x|$ lớn, $V(x)$ phải triệt tiêu rất nhanh. Điều này nghĩa là ta có thể khai triển tích phân

$$A_1 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta x^2}V(x)dx \simeq \int_{-\infty}^{\infty}(1-\beta x^2)V(x)dx = A - \beta B ,$$

$$B_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\beta x^2}V(x)dx \simeq \int_{-\infty}^{\infty} x^2V(x)dx = B ,$$

Khi đó, điều kiện cực tiểu $\frac{\delta\bar{H}}{\delta\beta} = 0$ sẽ cho

$$\frac{\hbar^2}{4m} + \frac{A_1}{2\sqrt{\pi\beta}} - \sqrt{\frac{\beta}{\pi}}B_1 = 0 ,$$

hay

$$\frac{\hbar^2}{4m} + \frac{A}{2\sqrt{\pi\beta}} - \frac{3}{2}\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\,B = 0\,,$$

nghĩa là,

$$\sqrt{\beta} = \frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB} + \sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2} + \frac{A}{3B}}\,.$$

Từ đó, năng lượng trạng thái liên kết được ước lượng bằng

$$\begin{aligned}\bar{E} &= -\frac{\hbar^2\beta}{4m} + 2\beta\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\,B \\ &= \left(\frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB} + \sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2} + \frac{A}{3B}}\right)^2 \left(\frac{-\hbar^2}{12m} - \sqrt{\frac{\hbar^4}{36m^2} + \frac{4AB}{3\pi}}\right)\end{aligned}$$

Bởi vì A và B cả hai đều âm, $\bar{E} < 0$. Từ đó

$$\bar{E} < \left(\frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB} + \sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2} + \frac{A}{3B}}\right)^2 \left(-\frac{\hbar^2}{4m}\right).$$

Vì đối với hai số thực bất kì a và b, $(a+b)^2 \geq 4ab$, giới hạn trên của $\bar{E}$ được cho bằng

$$\bar{E} < 4\left(-\frac{\hbar^2}{4m}\right)\frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB}\sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2} + \frac{A}{3B}} = \frac{-\pi\hbar^6}{144m^3B^2}\sqrt{1 + \frac{48m^2AB}{\pi\hbar^4}}$$

8021

Một hạt chuyển động trong một thế hút xuyên tâm $V(r) = -g^2/r^{3/2}$. Hãy sử dụng nguyên lý biến phân để tìm giới hạn trên đối với năng lượng trạng thái s thấp nhất. Hãy sử dụng hàm sóng của hệ loại hydro để làm hàm thử.

(*Chicago*)

Lời giải:

Để làm hàm thử, ta sẽ dùng hàm sóng trạng thái cơ bản chuẩn hóa của nguyên tử hydro,

$$\psi = \left(\frac{k^3}{8\pi}\right)^{1/2} e^{-kr/2}\,,$$

để tính năng lượng. Đối với một trạng thái s, $l = 0$ và

$$\begin{aligned}
\bar{H}(k) &= \int \psi^* H \psi d\tau \\
&= \int \psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) \right] \psi d\tau \\
&= \frac{k^3}{8\pi} \cdot 4\pi \int_0^{+\infty} r^2 e^{-kr/2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{g^2}{r^{3/2}} \right] e^{-kr/2} dr \\
&= \frac{k^3}{2} \int_0^{+\infty} e^{-kr} \left[-g^2 r^{1/2} + \frac{\hbar^2}{2m} kr - \frac{k^2 \hbar^2}{8m} r^2 \right] dr \\
&= \frac{k^3}{2} \left[\frac{\hbar^2}{4mk} - \frac{\sqrt{\pi} g^2}{2k^{3/2}} \right] \\
&= \frac{\hbar^2}{8m} k^2 - \frac{\sqrt{\pi} g^2}{4} k^{3/2} .
\end{aligned}$$

Để $\bar{H}$ là cực tiểu, $\frac{\partial \bar{H}}{\partial k} = 0$, nghĩa là $\frac{\hbar^2}{4m} k - \frac{3\sqrt{\pi}}{8} g^2 k^{1/2} = 0$, nó sẽ cho hai nghiệm $k_1 = 0$,

$$k_2^{1/2} = \frac{3\sqrt{\pi} g^2 m}{2\hbar^2} .$$

Vì nghiệm đầu tiên kéo theo $\psi = 0$ và do đó nó bị loại bỏ. Mặt khác, nếu $k_2^{1/2} = \frac{3\sqrt{\pi} g^2 m}{2\hbar^2}$, $\bar{H}$ sẽ đạt cực tiểu bằng $-\frac{27\pi^2 g^8 m^3}{128\hbar^6}$. Đây chính là cận trên của năng lượng trạng thái s thấp nhất.

8022

Một hệ hạt có spin 1 được tạo nên từ sự pha trộn của 3 trạng thái spin thuần khiết sau đây, mỗi trạng thái đều có xác suất ngang nhau, nghĩa là một phần ba số hạt ở trạng thái $\psi^{(1)}$, v.v.

$$\psi^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad \psi^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} , \quad \psi^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

(a) Hãy tìm vectơ phân cực cho từng trạng thái thuần khiết.

(b) Hãy tìm vectơ phân cực **P** cho trạng thái hỗn hợp nói trên.

(c) Hãy tính ma trận mật độ ρ cho hệ và kiểm tra rằng $Tr\rho = 1$.

(d) Sử dụng ρ, hãy tìm vectơ phân cực **P** và kiểm nghiệm lại câu (b).

Cho biết: với $J = 1$,

$$J_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \ J_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \ J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

(*Chicago*)

Lời giải:

(a) Vectơ phân cực đối với một trạng thái i được cho bằng

$$\mathbf{P}^{(i)} = \langle \psi^{(i)} | \mathbf{J} | \psi^{(i)} \rangle.$$

Như vậy

$$P_x^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1, 0, 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$$P_y^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1, 0, 0) \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0.$$

$$P_z^{(1)} = (1, 0, 0) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 1.$$

và do đó $\mathbf{P}^{(1)} = (0, 0, 1)$.

Tương tự, ta có

$$\mathbf{P}^{(2)} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{2} \right),$$

$$\mathbf{P}^{(3)} = (0, 0, -1).$$

(b) Đối với trạng thái hỗn tạp, **P** là tổng của các vectơ phân cực

$$\mathbf{P} = \frac{1}{3} \left[\mathbf{P}^{(1)} + \mathbf{P}^{(2)} + \mathbf{P}^{(3)} \right] = \frac{1}{6} (\sqrt{2}, 0, -1).$$

(c) Phân tích theo các vectơ trực chuẩn

$$|1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \ |2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}, \ |3\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}.$$

ta có

$$|\psi^{(1)}\rangle = |1\rangle, \ |\psi^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |3\rangle),$$
$$|\psi^{(3)}\rangle = |3\rangle.$$

Nói chung một trạng thái có thể khai triển thành

$$|\psi^{(i)}\rangle = \sum_{n=1}^{3} C_n^i |n\rangle,$$

trong đó $i = 1, 2, 3$. Ma trận mật độ được định nghĩa bằng

$$\rho = \sum_i \omega^{(i)} |\psi^{(i)}\rangle\langle\psi^{(i)}|,$$

trong đó $\omega^{(i)}$ là xác suất để hệ nằm trong trạng thái thuần khiết $|\psi^{(i)}\rangle$, hay

$$\rho_{mn} = \sum_i \omega^i C_n^{i*} C_m^i = \frac{1}{3}\sum_i C_n^{i*} C_m^i,$$

bởi vì $\omega^{(i)} = \frac{1}{3}$ cho tất cả các trạng thái i có mặt trong trường hợp này. Ma trận của hệ số là

$$C = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix},$$

và do đó

$$\rho = \frac{1}{3}C^+C = \begin{pmatrix}\frac{1}{3} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6}\\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

và

$$Tr\,\rho = \frac{1}{3} + \frac{1}{6} + \frac{1}{2} = 1\,.$$

(d) Vì $\mathbf{P} = \langle J \rangle = Tr(\rho J)$, ta có

$$P_x = Tr(\rho J_x) = Tr\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{2} & \frac{1}{6} \end{pmatrix}\right\} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{6} + \frac{1}{6}\right) = \sqrt{2}/6\,,$$

$$P_y = Tr(\rho J_y) = Tr\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & \frac{-i}{3} & 0 \\ \frac{i}{6} & \frac{i}{6} & \frac{-i}{6} \\ \frac{i}{6} & \frac{i}{2} & \frac{-i}{6} \end{pmatrix}\right\} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{i}{6} - \frac{i}{6}\right) = 0$$

$$P_z = Tr(\rho J_z) = Tr\begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{6} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{3} - \frac{1}{2} = -\frac{1}{6}\,,$$

kết quả thu được cũng giống như ở câu (b).

8023

Đơteron là trạng thái liên kết của một nơtron và một proton trong đó các spin kết hợp với nhau tạo thành mômen xung lượng toàn phần $S = 1$. Khi hấp thụ một tia gamma lớn hơn 2, 2 MeV, đơteron có thể phân rã thành một nơtron tự do và một proton tự do.

(a) Hãy viết hàm sóng cho trạng thái cuối trong phản ứng $\gamma + D \rightarrow n + p$ bằng cách sử dụng sóng phẳng và cần đảm bảo tính đến tọa độ spin thích hợp cho hai hạt. Giả sử rằng, tương tác với tia gamma là thông qua liên kết mômen lưỡng cực điện.

(b) Giả sử nơtron và proton được tìm thấy ở khoảng cách rất xa nhau sau phân rã của đơteron. Xét quá trình đó trong hệ tọa độ khối tâm, hãy tìm những hàm tương quan thời gian, không gian và spin. Giả định bia được tạo nên từ

các đơteron không phân cực. (Bạn có thể sử dụng định nghĩa sau đây cho hàm tương quan spin: Nếu một proton được tìm thấy với spin lên, thì xác suất để đơteron tương ứng cũng được tìm thấy với spin lên là bao nhiêu?)

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Trạng thái cơ bản của đơteron $^3S_1$ có chẵn lẻ dương. Chuyển dời mômen lưỡng cực điện đòi hỏi có sự thay đổi tính chẵn lẻ giữa các trạng thái đầu và cuối. Do đó, chẵn lẻ của hệ (n, p) tự do phải là -1. Giả sử rằng, hàm sóng của (n, p) có thể viết là $\Psi(n, p) \sim \psi(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_p)\chi(n, p)$. Với $\chi = \chi_1^3$, sau khi các nucleon được hoán vị hàm sóng trở thành $\Psi(p, n) = (-1)^l \Psi(n, p)$. Với $\chi = \chi_0^1$, sau khi các nucleon được hoán vị, hàm sóng trở thành $\Psi(p, n) = (-1)^{l+1}\Psi(n, p)$. Một hệ fermion phải phản đối xứng đối với hoán vị hai hạt, điều này nghĩa là, đối với trường hợp đầu, $l = 1, 3, \ldots$, và đối với trường hợp sau, $l = 0, 2, 4, \ldots$, và do đó, tính chẵn lẻ tương ứng là $-1(l = \text{lẻ})$ và $+1(l = \text{chẵn})$. Bằng cách xem xét các đòi hỏi, ta có thể thấy rằng, chỉ các trạng thái với $\chi = \chi_1^3$, nghĩa là trạng thái tam tuyến spin, là khả dĩ. Hơn nữa, $S = 1$, $L = 1, 3, \ldots$, và do đó $J = 0, 1, 2, \ldots$. Vì đơteron là không phân cực, hàm sóng spin có cùng xác suất sẽ là χ_{11}, χ_{10} hoặc χ_{1-1}. Như vậy, sau chuyển dời (n, p) có thể được biểu diễn thành tích của sóng phẳng và hàm sóng spin trung bình

$$\Psi(n, p) \sim e^{i(\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{r}_n + \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r}_p)} \cdot e^{-i(\omega_n t + \omega_p t)} (1/\sqrt{3})(\chi_{11} + \chi_{10} + \chi_{1-1}) \,.$$

(b) Sự tương quan thời gian và không gian được thể hiện trong sự bảo toàn năng lượng và bảo toàn xung lượng. Trong tọa độ khối tâm, nếu năng lượng của proton đo được là E_p, năng lượng của nơtron là $E_n = E_{\text{cm}} - E_p$; nếu xung lượng của proton là $\mathbf{p}$, xung lượng của nơtron là $-\mathbf{p}$. Gọi α là hàm spin cho spin lên, và β là cho spin xuống. Khi đó $\chi_{11} = \alpha(n)\alpha(p)$, $\chi_{1-1} = \beta(n)\beta(p)$, $\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(n)\beta(p) + \alpha(p)\beta(n)]$, và hàm sóng spin là

$$\chi(n, p) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\alpha(n) + \frac{1}{\sqrt{2}}\beta(n)\right]\alpha(p) + \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\alpha(n) + \beta(n)\right]\beta(p) \,.$$

Như vậy, nếu spin của p khi đo thấy là lên, ta có

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{3}}\alpha(n)\alpha(p) + \frac{1}{\sqrt{6}}\beta(n)\alpha(p) \,.$$

Do đó, xác suất để trạng thái spin của n cũng là lên, sẽ là

$$\frac{\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2}{\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{6}}\right)^2} = \frac{2}{3} \,.$$

8024

(a) Bạn được cho một hệ gồm hai hạt đồng nhất có thể chiếm một trong số ba mức năng lượng $\varepsilon_n = n\varepsilon$, $n = 0, 1, 2$. Trạng thái năng lượng thấp nhất, $\varepsilon_0 = 0$, là suy biến bội hai. Hệ là cân bằng nhiệt ở nhiệt độ T. Với mỗi trường hợp sau đây, hãy xác định hàm phân bố và năng lượng và liệt kê hết các cấu hình khả dĩ:

(1) Hạt tuân theo thống kê Fermi.

(2) Hạt tuân theo thống kê Bose.

(3) Hạt (bây giờ là không đồng nhất) tuân theo thống kê Boltzmann.

(b) Hãy thảo luận điều kiện để các fermion hay các boson có thể được coi như hệ những hạt Boltzmann.

(*Buffalo*)

Lời giải:

Kí hiệu hai trạng thái với $\varepsilon_0 = 0$ bằng A và B và các trạng thái với ε và 2ε tương ứng bằng 1 và 2.

(1) Hệ có thể có những cấu hình sau đây nếu các hạt tuân theo thống kê Fermi:

Các cấu hình: (A, B) (A, 1) (B, 1) (A, 2) (B, 2) (1, 2)

Năng lượng: 0 ε ε 2ε 2ε 3ε

Như vậy, hàm phân bố là $Z = 1 + 2e^{-\varepsilon} + 2e^{-2\varepsilon} + e^{-3\varepsilon}$,

và năng lượng trung bình là $\bar{\varepsilon} = (2\varepsilon e^{-\varepsilon} + 4\varepsilon e^{-2\varepsilon} + 3\varepsilon e^{-3\varepsilon})/Z$

(2) Nếu các hạt tuân theo thống kê Bose, thêm vào các trạng thái ở trên, còn có các cấu hình khả dĩ sau đây:

Các cấu hình: (A, A) (B, B) (1, 1) (2, 2)

Năng lượng: 0 0 2ε 4ε

Do đó, hàm phân bố và năng lượng trung bình là

$$Z = 3 + 2e^{-\varepsilon} + 3e^{-2\varepsilon} + e^{-3\varepsilon} + e^{-4\varepsilon}\,,$$

$$\bar{\varepsilon} = (2\varepsilon e^{-\varepsilon} + 6\varepsilon e^{-2\varepsilon} + 3\varepsilon e^{-3\varepsilon} + 4\varepsilon e^{-4\varepsilon})/Z\,.$$

(3) Cho các hạt không đồng nhất tuân theo thống kê Boltzmann, sẽ có nhiều cấu hình khả dĩ hơn. Đó là (B, A), (1, A), (1, B), (2, A), (2, B) và (2, 1).

Như vậy, ta có

$$Z = 4 + 4e^{-\varepsilon} + 5e^{-2\varepsilon} + 2e^{-3\varepsilon} + e^{-4\varepsilon},$$

$$\bar{\varepsilon} = (4\varepsilon e^{-\varepsilon} + 10\varepsilon e^{-2\varepsilon} + 6\varepsilon e^{-3\varepsilon} + 4\varepsilon e^{-4\varepsilon})/Z\,.$$

(b) Các fermion và boson có thể được xem như các hạt Boltzmann khi số hạt lớn hơn số mức năng lượng khả dĩ, vì khi đó, hiệu ứng trao đổi có thể bỏ qua.

8025

Xét một electron tự do gần mặt biên.

(a) Nếu $\phi_k(x)$ là hàm riêng electron, hãy chỉ ra rằng, hàm

$$u(x,t) = \sum_k \phi_k^*(x)\phi_k(0)\exp\left(\frac{-\varepsilon_k t}{\hbar}\right)$$

thỏa mãn một phương trình dạng phương trình khuếch tán. Hãy xác định hệ số khuếch tán tương ứng.

(b) Từ lý thuyết khuếch tán $u(0,t)$ sẽ bị ảnh hưởng gì do sự có mặt của biên ở khoảng cách l kể từ gốc tọa độ? Ảnh hưởng của biên sẽ được cảm nhận tức thì hay sau một khoảng thời gian?

(c) Hãy khảo sát biểu thức của $u(0,t)$ như một tổng theo k, được cho trong a). Phạm vi nào của ε_k có ảnh hưởng đáng kể đến $u(0,t)$ ở thời điểm, khi electron cảm nhận được ảnh hưởng của biên?

(Buffalo)

Lời giải:

(a) Hàm sóng $\phi_k(x)$ thỏa mãn phương trình Schrödinger của một hạt tự do

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi_k(\mathbf{x}) = \varepsilon_k\phi_k(\mathbf{x})\,.$$

Như vậy

$$\nabla^2 u(\mathbf{x},t) = -\frac{2m}{\hbar^2}\sum_k \varepsilon_k\phi_k^*(\mathbf{x})\phi_k(0)\exp\left(-\frac{\varepsilon_k t}{\hbar}\right)\,.$$

Bởi vì

$$\frac{\partial}{\partial t}u(\mathbf{x},t) = -\frac{1}{\hbar}\sum_k \varepsilon_k\phi_k^*(\mathbf{x})\phi_k(0)\exp\left(-\frac{\varepsilon_k t}{\hbar}\right)\,,$$

$u(x,t)$ thỏa mãn phương trình dạng khuếch tán

$$\frac{\partial}{\partial t}u(\mathbf{x},t) = \frac{\hbar}{2m}\nabla^2 u(\mathbf{x},t)\,.$$

Hệ số khuếch tán tương ứng là $\hbar/2m$.

(b) Ban đầu $u(x,0) = \delta(x)$. Khi $t > 0$, hàm u bắt đầu khuếch tán về cả hai phía. Electron không cảm nhận được sự tồn tại của biên trước một khoảng thời gian nào đó.

(c) Giả sử biên là ở $x = l$. Nghiệm của phương trình khuếch tán là

$$u(\mathbf{x},t) = c\exp\left[-\frac{m}{2\hbar t}(y^2+z^2)\right] \times\left\{\exp\left[-\frac{m}{2\hbar t}x^2\right] - \exp\left[-\frac{m}{2\hbar t}(x-2l)^2\right]\right\}\,.$$

Khi không có biên (nghĩa là, $l \to \infty$), nghiệm sẽ là

$$u(\mathbf{x},t) = c\exp\left[-\frac{m}{2\hbar t}(y^2+z^2)\right]\exp\left(-\frac{m}{2\hbar t}x^2\right)\,.$$

Từ hai biểu thức nói trên, ta nhận thấy rằng, chỉ khi $\frac{m}{2\hbar t}(0-2l)^2 \sim 1$, nghĩa là, ở thời điểm $t \sim 2ml^2/\hbar$, electron bắt đầu cảm nhận được sự tồn tại của biên.

Xét

$$u(0,t) = \sum_k |\phi_k(0)|^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_k t}{\hbar}\right)\,.$$

Chỉ những trạng thái ϕ_k sao cho năng lượng ε_k thỏa mãn điều kiện $\frac{\varepsilon_k t}{\hbar} \lesssim 1$ mới cho đóng góp đáng kể vào $u(0,t)$. Vào thời điểm $t \sim \frac{2ml^2}{\hbar}$, ta yêu cầu $\varepsilon_k \le \frac{\hbar^2}{2ml^2}$ để ϕ_k tạo ra một sự đóng góp đáng kể.

8026

Đối xứng hóa các phương trình Maxwell bằng cách giả định có đơn cực từ với từ tích có độ lớn bằng g, Dirac đã đi đến điều kiện lượng tử hóa

$$\frac{eg}{\hbar c} = n\,,$$

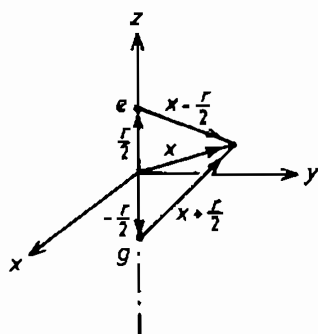
trong đó n = một số nguyên, e là điện tích, và g là từ tích.

Theo tinh thần của quy trình lượng tử hóa Bohr - Sommerfeld, hãy tìm lại theo cách bán cổ điển, điều kiện lượng tử hóa tương tự, bằng cách lượng tử

hóa mômen xung lượng của trường trong hệ lưỡng cực hỗn hợp, như được vẽ trong Hình 8.6.

Gợi ý: Mômen xung lượng của trường có liên quan như thế nào với vectơ Poynting?

(*Columbia*)



Hình 8.6

Lời giải:

Trường điện từ được tạo nên từ hai thành phần

$$E = \frac{e\left(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{r}}{2}\right)}{|\mathbf{x} - \frac{\mathbf{r}}{2}|^3},$$

$$\mathbf{B} = \frac{g\left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}}{2}\right)}{|\mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}}{2}|^3}.$$

Trong hệ tọa độ trụ (ρ, θ, z), ta có thể viết $\mathbf{r} = 2a\mathbf{e}_3$, trong đó $a = |\mathbf{r}|/2$, và

$$\mathbf{x} = \rho\cos\theta\mathbf{e}_1 + \rho\sin\theta\mathbf{e}_2 + z\mathbf{e}_3,$$

Mômen xung lượng điện từ là

$$\mathbf{L}_{em} = \frac{1}{4\pi c}\int \mathbf{x} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B})d^3x.$$

Vì

$$\mathbf{E} \times \mathbf{B} = eg\,\frac{\left(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{r}}{2}\right) \times \left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}}{2}\right)}{|\mathbf{x} - \frac{\mathbf{r}}{2}|^3 \cdot |\mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}}{2}|^3}$$

$$= \frac{eg\mathbf{x} \times \mathbf{r}}{\left[\left(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{r}}{2}\right)^2 \left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}}{2}\right)^2\right]^{3/2}},$$

$$\mathbf{x} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) = \frac{eg[(\mathbf{x} \cdot \mathbf{r})\mathbf{x} - x^2\mathbf{r}]}{[(\rho^2 + z^2 + a^2 - 2az)(\rho^2 + z^2 + a^2 + 2az)]^{3/2}}$$

$$= \frac{2aeg(z\rho\cos\theta\mathbf{e}_1 + z\rho\sin\theta\mathbf{e}_2 - \rho^2\mathbf{e}_3)}{[(\rho^2 + z^2 + a^2) - 4a^2z^2]^{3/2}},$$

$$\int_0^{2\pi} \cos\theta d\theta = \int_0^{2\pi} \sin\theta d\theta = 0,$$

ta có

$$\mathbf{L}_{em} = -\frac{aeg}{2\pi c}\,\mathbf{e}_3 \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} \frac{\rho^3 d\rho}{[(\rho^2 + z^2 + a^2)^2 - 4a^2z^2]^{3/2}}$$

$$= -\mathbf{e}_3 \left(\frac{eg}{c}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_0^{\infty} \frac{s^3 ds}{[(s^2 + t^2 + 1)^2 - 4t^2]^{3/2}},$$

trong đó $s = \rho/a$, $t = z/a$. Có thể chứng tỏ rằng

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_0^{\infty} \frac{s^3 ds}{[(s^2 + t^2 + 1)^2 - 4t^2]^{3/2}} = 1.$$

Như vậy

$$\mathbf{L}_{em} = -\frac{eg}{c}\,\mathbf{e}_3.$$

Điều kiện lượng tử hóa do đó sẽ là

$$|\mathbf{L}_{emz}| = \frac{eg}{c} = n\hbar,$$

hay

$$\frac{eg}{\hbar c} = n, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots .$$

8027

Trong bức tranh thô, một kim loại được nhìn nhận như một hệ electron tự do bị giam trong một hố thế có độ cao V_0. Do chuyển động nhiệt, electron với

năng lượng đủ lớn sẽ có thể vượt khỏi hố thế. Hãy tìm và thảo luận mật độ dòng phát electron cho mô hình này.

(*Buffalo*)



Hình 8.7

Lời giải:

Hệ electron tự do có thể coi như một khí electron với thể tích V và tuân theo thống kê Fermi-Dirac. Ở nhiệt độ tuyệt đối T mật độ electron với xung lượng giữa $\mathbf{P}$ và $\mathbf{P} + d\mathbf{P}$, trong đó $\mathbf{P} = (P_x, P_y, P_z)$, là

$$\frac{dN}{V} = \frac{1}{V} \cdot \frac{dP_x dP_y dP_z}{e^{(\varepsilon-\mu)/kT} + 1} \cdot \frac{2V}{h^3}$$

trong đó, thừa số 2 là bội suy biến bởi vì electron có hai hướng spin.

Xét số electron, j_n, đi ra khỏi V theo phương z qua một đơn vị diện tích tiết diện và trong một đơn vị thời gian. Những electron như vậy phải có tốc độ

$$v_z = \frac{P_z}{m} \geq \frac{1}{m}\sqrt{2mV_0}\,.$$

Do đó

$$j_n = \int v_z \frac{dN}{V} = \frac{2}{mh^3} \int_{\sqrt{2mV_0}}^{\infty} P_z dP_z$$
$$\times \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dP_x dP_y}{\exp\left\{\left[\frac{1}{2m}\left(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2\right) - \mu\right]/kT\right\} + 1}\,,$$

hay, bằng cách đặt $P_x^2 + P_y^2 = P_r^2$, $dP_x dP_y = 2\pi P_r dP_r$, và bỏ qua số 1 ở mẫu số,

$$j_n \approx \frac{4\pi}{mh^3} \int_{\sqrt{2mV_0}}^{\infty} P_z dP_z \int_0^{\infty} \exp\left\{-\frac{1}{kT}\left[\frac{1}{2m}\left(P_z^2 + P_r^2\right) - \mu\right]\right\} P_r dP_r$$
$$= \frac{4\pi kT}{h^3} \int_{\sqrt{2mV_0}}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{kT}\left(\frac{P_z^2}{2m} - \mu\right)\right] P_z dP_z$$
$$= \frac{4\pi mk^2T^2}{h^3} e^{-(V_0-\mu)/kT}\,.$$

Mật độ dòng điện khi đó sẽ là

$$j_e = -ej_n = -\frac{4\pi mek^2T^2}{h^3} e^{-(V_0-\mu)/kT} .$$

Chú ý rằng, trong phần trên, để đơn giản hóa việc tính tích phân, ta đã giả sử rằng

$$kT \ll \frac{1}{2m} \cdot 2mV_0 - \mu = V_0 - \mu .$$

Ở $T = 0$ mật độ số electron là

$$n = \frac{2}{h^3} \cdot \frac{4\pi}{3} P_0^3 = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3} (2m\mu_0)^{3/2} ,$$

trong đó P_0, μ_0, là xung lượng và năng lượng giới hạn. Ở nhiệt độ thường ta có

$$\mu \approx \mu_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} .$$

Đại lượng $V_0 - \mu$ là công thoát electron của kim loại và việc phát electron từ các âm cực nóng sáng được gọi là hiệu ứng Richardson.

8028

Mọi người đều biết rằng có ít nhất ba loại nơtrino. Chúng được phân biệt với nhau nhờ các phản ứng trong đó nơtrino được sinh ra hoặc bị hấp thụ. Ta kí hiệu ba loại nơtrino đó là ν_e, ν_μ và ν_τ. Có thể cho rằng mỗi loại nơtrino có một khối lượng nghỉ rất nhỏ nhưng hữu hạn, khác nhau cho các loại nơtrino. Giả sử rằng, trong bài toán này, có một tương tác nhiễu loạn nhỏ giữa các loại nơtrino, mà khi không có nó, tất cả các loại nơtrino đều có cùng khối lượng nghỉ bằng M_0. Giả sử yếu tố ma trận nhiễu loạn có cùng giá trị thực $\hbar\omega_1$ giữa các cặp nơtrino. Nó có giá trị trung bình bằng không trong mỗi trạng thái của ν_e, ν_μ và ν_τ.

(a) Một nơtrino loại ν_e được sinh ra ở trạng thái nghỉ vào thời điểm không. Xác suất, như một hàm đối với thời gian, để mỗi nơtrino nằm trong trạng thái của hai nơtrino còn lại là bao nhiêu?

(b) [Có thể trả lời độc lập với (a)] Một thí nghiệm dò tìm sự dao động nơtrino đã được thiết lập. Quỹ đạo bay của các nơtrino là 2000 m. Năng lượng của chúng là 100 GeV. Độ nhạy đảm bảo để sự có mặt của 1% một loại nơtrino nào đó, khác với loại nơtrino được sinh ra ở đầu quỹ đạo bay, đều có thể đo

được một cách chắc chắn. Lấy M_0 là 20 electron vôn. Giá trị nhỏ nhất của $\hbar\omega_1$ là bao nhiêu để có thể dò được? Giá trị này phụ thuộc vào M_0 như thế nào?

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Trong biểu diễn $|\nu_e\rangle$, $|\nu_\mu\rangle$ và $|\nu_\tau|$, ma trận Hamiltonian của hệ là

$$H = \begin{pmatrix} M_0 & \hbar\omega_1 & \hbar\omega_1 \\ \hbar\omega_1 & M_0 & \hbar\omega_1 \\ \hbar\omega_1 & \hbar\omega_1 & M_0 \end{pmatrix} .$$

Phương trình Schrödinger

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} + H\Psi = 0 ,$$

trong đó $\Psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$, a_i là hàm sóng cho trạng thái ν_i, sẽ có dạng ma trận

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{a}_1 \\ \dot{a}_2 \\ \dot{a}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_0 & \hbar\omega_1 & \hbar\omega_1 \\ \hbar\omega_1 & M_0 & \hbar\omega_1 \\ \hbar\omega_1 & \hbar\omega_1 & M_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

với điều kiện ban đầu

$$a_1(0) = 1,\ a_2(0) = a_3(0) = 0 .$$

Nghiệm của phương trình trên là

$$\begin{cases} a_1(t) = e^{-iM_0t/\hbar} \left(\frac{2}{3}\, e^{i\omega_1 t} + \frac{1}{3}\, e^{-i2\omega_1 t}\right), \\ a_2(t) = \frac{1}{3}\, e^{-iM_0t/\hbar} \,(e^{-2\omega_1 t} - e^{i\omega_1 t}), \\ a_3(t) = \frac{1}{3}\, e^{-iM_0t/\hbar} \,(e^{-2\omega_1 t} - e^{i\omega_1 t}) . \end{cases}$$

Do đó, xác suất để nơtrino nằm trong trạng thái ν_μ và ν_τ là

$$\begin{cases} P(\nu_\mu) = |a_2(t)|^2 = \frac{2}{9}\,(1 - \cos 3\omega_1 t) , \\ P(\nu_\tau) = |a_3(t)|^2 = \frac{2}{9}\,(1 - \cos 3\omega_1 t) . \end{cases}$$

(b) Thời gian bay của ν_e là $\Delta t = \frac{l}{v}$ nếu tính trong thời gian riêng của phòng thí nghiệm, hoặc$\Delta\tau = \Delta t\sqrt{1-(\frac{v}{c})^2} \approx \frac{l}{c}\frac{M_0}{E}$, trong đó E là năng lượng toàn phần, nếu tính trong hệ quy chiếu đứng yên của ν_e. Với $P(\nu_\mu) \geq 1\%$, nghĩa là,

$$\frac{2}{9}\left[1-\cos(3\omega_1\Delta\tau)\right] \gtrsim 0,01\,,$$

suy ra

$$\omega_1 \geq \frac{\cos^{-1}0,955}{3\Delta\tau} = \frac{0,301}{3\Delta\tau} = \frac{0,1cE}{lM_0}\,,$$

hay

$$\hbar\omega_1 \geq \frac{0,1\times 3\times 10^8\times 100\times 10^9\times 6,58\times 10^{-16}}{2000\times 20} = 0,05\ \text{eV}\,.$$

8029

Trong một gần đúng tốt, một electron trong mạng tinh thể chịu sự tác dụng của một thế tuần hoàn được vẽ như trong Hình 8.8.

Có một định lý (Định lý Froquet) và một thực tế vật lý, nói rằng, phổ của mọi thế tuần hoàn như thế được tách thành những dải liên tục ngăn bởi các khe cấm. Để xây dựng một mô hình thô cho hiệu ứng nói trên (đối với dải thấp nhất), ta hãy tưởng tượng rằng, những hàng rào thế là cao đến mức, tập hợp các "trạng thái cơ bản" $|n\rangle$ $(-\infty < n < +\infty)$ (một cho mỗi hố thế) là các trạng thái riêng gần đúng. Gọi E_0 là năng lượng của mỗi $|n\rangle$. Bây giờ giả sử $\varepsilon = |\varepsilon|e^{i\alpha}$ là biên độ (nhỏ) đối với hiệu ứng đường ngầm giữa bất cứ hai hố thế nào cạnh nhau (xác suất để có $|n-1\rangle \leftarrow |n\rangle \rightarrow |n+1>$ là $|\varepsilon|^2$). Hãy thiết lập một Hamiltonian Hecmite để mô tả tình trạng này. Hãy tính năng lượng $E(\theta)$ của (các) trạng thái

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta}|n\rangle\,.$$

Bề rộng của các dải đó là bao nhiêu?

(Berkeley)



Hình 8.8

Lời giải:

Ta viết Hamiltonian như một ma trận, chọn $|n\rangle$ làm các vectơ cơ sở. Giả sử

$$H|n\rangle = E_0(1-\varepsilon-\varepsilon^*)|n\rangle + E_0\varepsilon|n+1\rangle + E_0\varepsilon^*|n-1\rangle,$$

ta có

$$\begin{aligned}\langle m|H|n\rangle &= \int \psi^*(x-ma)H\psi(x-na)dx \\ &- E_0\int \psi^*(x-ma)\psi(x-na)dx \\ &= \delta_{mn}E_0(1-\varepsilon-\varepsilon^*) + \delta_{m,n+1}\varepsilon E_0 + \delta_{m,n-1}\varepsilon^* E_0,\end{aligned}$$

trong đó, ta đã sử dụng giả thiết rằng, hiệu ứng đường ngầm chỉ xảy ra giữa hai hố thế liền kề và biên độ cho mỗi hiệu ứng đường ngầm sang phải là $\varepsilon = |\varepsilon|e^{i\alpha}$, và sang trái là là $\varepsilon^* = |\varepsilon|e^{-i\alpha}$. Như vậy, ma trận của H là

$$H = \begin{array}{c} \langle 1| \\ \langle 2| \\ \langle 3| \\ \vdots \\ \vdots \end{array}\begin{pmatrix} E_0(1-\varepsilon-\varepsilon^*) & \varepsilon E_0 & & \mathbf{0} \\ \varepsilon^* E_0 & E_0(1-\varepsilon-\varepsilon^*) & \varepsilon E_0 & \ddots \\ & \varepsilon^* E_0 & E_0(1-\varepsilon-\varepsilon^*) & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \\ \mathbf{0} & & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$|1\rangle \qquad\qquad |2\rangle \qquad\qquad |3\rangle \quad \ldots\ldots\ldots$$

và

$$\begin{aligned}H|\theta\rangle =& E_0\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta}|n\rangle(1-\varepsilon-\varepsilon^*) + E_0\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta}(\varepsilon|n+1\rangle + \varepsilon^*|n-1\rangle) \\ &= E_0(1-2|\varepsilon|\cos\alpha)|\theta\rangle + E_0\sum_{n=-\infty}^{+\infty}[e^{i(n-1)\theta}\varepsilon + e^{i(n+1)\theta}\varepsilon^*]|n\rangle \\ &= E_0[1-2|\varepsilon|\cos\alpha + 2|\varepsilon|\cos(\theta-\alpha)]|\theta\rangle.\end{aligned}$$

Do đó, giá trị riêng năng lượng của $|\theta\rangle$ là

$$\begin{aligned}E_\theta &= E_0[1-2|\varepsilon|(\cos\alpha - \cos(\theta-\alpha))] \\ &= E_0\left[1-4|\varepsilon|\sin\frac{\theta}{2}\sin\left(\frac{\theta}{2}-\alpha\right)\right].\end{aligned}$$

Từ các kết quả này có thể suy ra những kết luận sau đây:

(i) Sự biến thiên liên tục của θ sẽ kéo theo biến thiên liên tục của năng lượng, các mức năng lượng tạo thành một dải năng lượng. Hơn thế nữa, khi $\theta = \alpha$, $E_\theta = E_{max} = E_0\{1 + 2|\varepsilon|(1 - \cos\alpha)\}$, và khi $\theta = \pi + \alpha$, $E_0 = E_{min} = E_0\{1 - 2|\varepsilon|(1 + \cos\alpha)\}$. Cho nên, độ rộng của dải là $E_{max} - E_{min} = 4|\varepsilon|E_0$.

(ii) Khi α, phụ thuộc vào hình dạng của hố thế tuần hoàn, là đủ nhỏ, hiệu ứng đường ngầm giữa các hố thế kề nhau luôn kéo theo một sự hạ thấp năng lượng trạng thái cơ bản.

8030

Xét một nguyên tử Al lý tưởng hóa (coi như một điện tích điểm) ($Z = 13$, $A = 27$). Nếu một lepton âm hoặc một meson bị bắt giữ bởi nguyên tử đó, nó sẽ nhanh chóng nhảy từng bậc xuống n trạng thái thấp hơn mà tất cả đều nằm bên trong lớp vỏ electron. Xét trường hợp bắt giữ μ:

(a) Hãy tính năng lượng E_1 cho μ trên quỹ đạo $n = 1$; đồng thời hãy ước lượng bán kính trung bình. Bỏ qua những hiệu ứng tương đối tính và chuyển động của hạt nhân.

(b) Hãy tính bổ chính cho E_1 khi kể đến chuyển động của hạt nhân.

(c) Hãy tìm một số hạng nhiễu loạn cho Hamiltonian sinh ra bởi động học tương đối tính, trong khi spin vẫn được bỏ qua. Hãy ước lượng bổ chính thu được cho E_1.

(d) Hãy định nghĩa bán kính hạt nhân. So sánh bán kính này cho Al với bán kính trung bình cho quỹ đạo $n = 1$ được nói đến trong câu (a). Thảo luận một cách định tính xem điều gì sẽ xảy ra cho μ^- khi hàm sóng μ^- trong nguyên tử chồng phủ một cách thực sự lên hạt nhân? Điều gì xảy ra cho π^- trong hoàn cảnh đó? Một số thông tin có thể có liên quan là

$$M_\mu = 105\,\text{MeV}/c^2, \quad \text{SPIN}(\mu) = 1/2\,,$$
$$M_\pi = 140\,\text{MeV}/c^2, \quad \text{SPIN}(\pi) = 0\,.$$

(*Berkeley*)

Lời giải:

(a) Chúng ta sẽ bỏ qua hiệu ứng của các electron bên ngoài hạt nhân và chỉ xét đến chuyển động của μ trong trường Coulomb của hạt nhân Al. Các mức năng lượng của μ trong nguyên tử kiểu hydro với điện tích hạt nhân Ze

(trong gần đúng phi tương đối tính) là

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{Z^2}{n^2}.$$

Như vậy

$$E_1 = -\frac{m}{m_e}\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}Z^2 = -\frac{105}{0,51}\times 13,6\times 13^2\,\text{eV}$$
$$= -0,4732\,\text{MeV},$$
$$a = \frac{\hbar^2}{Zme^2} = \frac{m_e}{Zm}\frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{0,5}{13\times 105}\times 0,53\,\text{Å}$$
$$= 1,9\times 10^{-4}\,\text{Å}.$$

(b) Để tính đến chuyển động của hạt nhân, ta đơn giản chỉ thay thế khối lượng m của meson bằng khối lượng rút gọn $\mu = \frac{Mm}{M+m}$, M là khối lượng của hạt nhân. Như vậy

$$E_1' = \frac{\mu}{m}E_1 = \frac{1}{1+\frac{m}{M}}E_1 = \frac{-0,4732}{1+\frac{105}{27\times 938}}$$
$$= -0,471\,\text{MeV}.$$

(c) Khi kể đến hiệu ứng tương đối tính, động năng của muon là

$$T = \sqrt{p^2c^2+m^2c^4} - mc^2 = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \cdots.$$

Bổ chính tương đối tính sẽ dẫn đến một Hamiltonian nhiễu loạn

$$H = -\frac{p^4}{8m^3c^2}.$$

Bổ chính năng lượng ΔE cho E_1 khi đó là

$$\Delta E = \langle 100| - \frac{p^4}{8m^3c^2}|100\rangle$$
$$= -\frac{1}{2mc^2}\langle 100|\frac{p^2}{2m}\cdot\frac{p^2}{2m}|100\rangle$$
$$= -\frac{1}{2mc^2}\langle 100|\left(H+\frac{Ze^2}{r}\right)\left(H+\frac{Ze^2}{r}\right)|100\rangle$$
$$= -\frac{1}{2mc^2}\langle 100|\left(E_1+\frac{Ze^2}{r}\right)^2|100\rangle.$$

Với một ước lượng thô, lấy $r \approx a$. Khi đó

$$\Delta E \approx -\frac{1}{2mc^2}\left(E_1 + \frac{Ze^2}{a}\right)^2 = -\frac{|E_1|^2}{2mc^2} = \frac{-0,47^2}{2 \times 105} = 1,06 \times 10^{-3}\,\text{MeV}$$

(d) Trong quá trình tán xạ nơtron gây ra bởi hạt nhân, một lực hấp dẫn hạt nhân mạnh sẽ có mặt khi khoảng cách trở nên nhỏ hơn so với $r \sim r_0 A^{\frac{1}{3}}$, trong đó $r_0 \sim 1,2 \times 10^{-13}$cm và A là số khối của hạt nhân. r nói chung được lấy là bán kính của hạt nhân, mà trong trường hợp của Al là

$$r = 1,2 \times 10^{-5} \times 27^{\frac{1}{3}} = 3/6 \times 10^{-5}\,\text{Å}.$$

Hiệu giữa bán kính của hạt nhân Al và của bán kính quỹ đạo thứ nhất của nguyên tử μ là không lớn lắm, cho nên, có một sự chồng chập đáng kể hàm sóng của hạt nhân và của muon. Hiệu ứng này, gây ra bởi tính hữu hạn thể tích của hạt nhân, nó sẽ dẫn đến một bổ chính dương cho năng lượng. Đồng thời còn có một tương tác khá lớn giữa muon và mômen từ của hạt nhân.

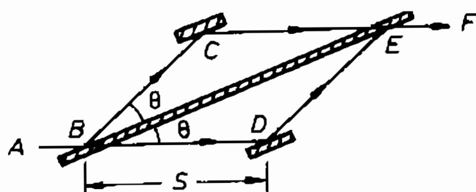
Nguyên tử π-meson, tình huống cũng tương tự, đó là có hiệu ứng thể tích, chỉ có điều sẽ không có tương tác với mômen từ của hạt nhân vì các pion không có spin.

8031

Những nơtron năng lượng thấp từ các lò phản ứng hạt nhân thường được sử dụng để kiểm chứng hiện tượng giao thoa lượng tử cảm ứng do hấp dẫn (gravitationally induced quantum interference). Trong Hình 8.9, các nơtron tới từ A có thể đi qua hai đường cùng độ dài, ABCEF và ABDEF, và giao thoa sau khi gặp nhau tại E. Ba mảnh song song dùng để nhiễu xạ nơtron được cắt ra từ một đơn tinh thể duy nhất. Để thay đổi hiệu ứng của thế năng hấp dẫn, hệ có thể được quay xung quanh đường ABD. Giả sử ϕ là góc quay ($\phi = 0$ khi đường ABCEF nằm ngang).

(a) Hãy chỉ ra rằng hiệu pha ở điểm E gây ra bởi hiệu ứng hấp dẫn bằng $\beta = q\sin\phi$, trong đó $q = K\lambda S^2 \sin 2\theta$, λ là bước sóng của nơtron và K, một hằng số thích hợp phụ thuộc vào khối lượng nơtron m, gia tốc trọng trường g, hằng số Planck $\hbar$, và các thừa số bằng số. Hãy xác định hằng số K. Giả sử rằng, ở đây hiệu thế năng hấp dẫn là rất nhỏ so với động năng của nơtron.

(b) Bước sóng của nơtron được sử dụng trong thí nghiệm là 1,45 Å. Động năng tương ứng theo đơn vị electron - vôn là bao nhiêu?



Hình 8.9

(c) Nếu $S = 4$ cm, $\theta = 22,5°$, và $\lambda = 1,45$ Å, có thể thu được bao nhiêu cực đại, nếu có một máy đếm nơtron đặt ở F với ϕ trong khoảng từ $-90°$ đến $+90°$?

Khối lượng nơtron $= 939\,\text{MeV}/c^2$, $\hbar c = 1,97 \times 10^{-11}$ MeV · cm.

(CUS)

Lời giải:

(a) Hàm sóng của các nơtron tới có thể lấy là

$$\psi(\mathbf{r}, t) = ce^{(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - iEt)/\hbar},$$

trong đó c là hằng số. Khi các neutron chuyển động theo một quỹ đạo nào đó từ $x = 0$ đến $x = l$ hàm sóng trở thành

$$\psi(\mathbf{r}, t) = c\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^l \sqrt{2m(E-V)}\,dx - \frac{i}{\hbar}Et\right].$$

Như vậy, pha sẽ là

$$\varphi = \frac{1}{\hbar}\int_0^l \sqrt{2m(E-V)}\,dx - \frac{1}{\hbar}Et.$$

Các nơtron được tách ở điểm B thành hai tia 1 và 2, với $\varphi_{B_1} = \varphi_{B_2}$.

Tình trạng trên đường BC và DE là như nhau và do đó đối với hai tia nơtron, $\Delta\varphi_{CB} = \Delta\varphi_{ED}$. Trên đường BD, ta có thể đặt thế hấp dẫn $V = 0$, $E = E_0$, và do đó

$$\begin{aligned}\Delta\varphi_{DB} &= \frac{1}{\hbar}\int_0^S \sqrt{2mE_0}\,dx - \frac{1}{\hbar}E_0\cdot\frac{S}{v_0}\\ &= \frac{1}{\hbar}\left(\sqrt{2mE_0}\,S - \frac{1}{2}\sqrt{2mE_0}\,S\right) = \frac{S}{2\hbar}\sqrt{2mE_0},\end{aligned}$$

trong đó v_0 là tốc độ nơtron bằng $\frac{1}{m}\sqrt{2mE_0}$.

Trên đường CE, thế hấp dẫn là

$$V = mgh = mg \cdot \overline{BE} \sin\theta \sin\phi, \quad \text{với } \overline{BE} = 2S\cos\theta\,,$$

nghĩa là,

$$V = mgS \sin 2\theta \sin\phi\,,$$

và

$$\begin{aligned}
\Delta\varphi_{EC} &= \frac{1}{\hbar}\int_0^S \sqrt{2m(E_0 - V)}\,dx - \frac{1}{\hbar}E_0 t \\
&= \frac{S}{\hbar}\sqrt{2mE_0}\sqrt{1 - \frac{V}{E_0}} - \frac{1}{\hbar}E_0 \frac{S}{\sqrt{\frac{2(E_0 - V)}{m}}} \\
&= S\,\frac{\sqrt{2mE_0}}{2\hbar}\left(2\sqrt{1 - \frac{V}{E_0}} - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V}{E_0}}}\right).
\end{aligned}$$

Như vậy hiệu pha của hai tia nơtron ở điểm F là

$$\begin{aligned}
\beta = \Delta\varphi_{DB} - \Delta\varphi_{EC} &= \frac{S}{2\hbar}\sqrt{2mE_0}\left(1 - 2\sqrt{1 - \frac{V}{E_0}} + \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V}{E_0}}}\right) \\
&\approx \frac{S}{2\hbar}\sqrt{2mE_0}\left[1 - 2\left(1 - \frac{V}{2E_0}\right) + \left(1 + \frac{V}{2E_0}\right)\right] \\
&= \frac{3VS}{4\hbar E_0}\sqrt{2mE_0}
\end{aligned}$$

vì $V \ll E_0$. Như vậy,

$$\beta = q\sin\phi\,,$$

trong đó

$$\begin{aligned}
q &\approx \frac{3}{2}\frac{m^2 g}{\hbar\sqrt{2mE_0}} S^2 \sin 2\theta \\
&= K\lambda S^2 \sin 2\theta
\end{aligned}$$

với

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_0}}\,,$$

$$K = \frac{3}{4}\frac{m^2 g}{\pi\hbar^2}\,.$$

(b) Nơtron có xung lượng là

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$$

và do đó có động năng

$$\begin{aligned} E_k &= \frac{p^2}{2m} = \frac{2}{mc^2}\left(\frac{\pi\hbar c}{\lambda}\right)^2 \\ &= \frac{2}{939 \times 10^6}\left(\frac{\pi \times 1,97 \times 10^{-5}}{1,45 \times 10^{-8}}\right)^2 \\ &= 0,039\,\text{eV} \end{aligned}$$

(c) Trong khoảng $-1 < \sin\phi < 1$, số cực đại có thể thu được nhờ một máy đếm nơtron ở F là

$$\begin{aligned} n &= \frac{2q}{2\pi} = \frac{3}{4}\left(\frac{Smc^2}{\pi\hbar c^2}\right)^2 g\lambda \sin 2\theta \\ &= \frac{3}{4}\left(\frac{4 \times 939}{\pi \times 1,97 \times 10^{-11} \times 3 \times 10^{10}}\right)^2 \times 980 \times 1,45 \times 10^{-8} \times \sin 45^\circ \\ &= 30\,. \end{aligned}$$

8032

Xét phương trình Dirac một chiều

$$H\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\,,$$

trong đó

$$H = c\alpha p_z + \beta mc^2 + V(z) = c\alpha\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right) + \beta mc^2 + V(z)\,,$$

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

I là ma trận đơn vị 2×2.

(a) Hãy chứng tỏ rằng $\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}$ giao hoán với H.

(b) Sử dụng kết quả câu (a) để chứng tỏ rằng, phương trình Dirac một chiều có thể viết thành hai phương trình vi phân bậc nhất liên kết với nhau.

(Buffalo)

Lời giải:

(a) Vì

$$[\sigma, \alpha] = \left[\begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix}\right] = 0,$$

$$[\sigma, \beta] = \left[\begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}\right] = 0,$$

ta có

$$[\sigma, H] = [\sigma, c\alpha p_z + \beta mc^2 + V] = c[\sigma, \alpha]p_z + [\sigma, \beta]mc^2 = 0.$$

(b) Vì $[\sigma, H] = 0, \sigma$ và H có hệ hàm riêng chung. σ là ma trận chéo. Gọi hàm riêng của nó là $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$. Vì

$$\sigma \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \\ \psi_3 \\ -\psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \\ \psi_3 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \\ 0 \\ \psi_4 \end{pmatrix},$$

nên σ có hàm riêng là $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \\ \psi_3 \\ 0 \end{pmatrix}$ và $\begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \\ 0 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$ với giá trị riêng tương ứng là $+1$ và -1.

Thay chúng vào phương trình Dirac, ta thu được

$$\left(-i\hbar c \frac{\partial}{\partial z} + V\right) \begin{pmatrix} \psi_3 \\ 0 \\ \psi_1 \\ 0 \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \\ -\psi_3 \\ 0 \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \\ \psi_3 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\left(-i\hbar c\frac{\partial}{\partial z}+V\right)\begin{pmatrix}0\\-\psi_4\\0\\-\psi_2\end{pmatrix}+mc^2\begin{pmatrix}0\\\psi_2\\0\\-\psi_4\end{pmatrix}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}0\\\psi_2\\0\\\psi_4\end{pmatrix}.$$

Mỗi phương trình đều diễn tả hai phương trình vi phân liên kết với nhau. Tuy nhiên, hai hệ phương trình đó trùng nhau nếu làm phép thay thế $\psi_3 \to -\psi_4$, $\psi_1 \to \psi_2$. Như vậy, phương trình Dirac một chiều có thể viết thành hệ hai phương trình vi phân bậc nhất liên kết.

8033

(a) Hãy viết phương trình Dirac dưới dạng Hamiltonian cho một hạt tự do, và cho dạng tường minh của các ma trận Dirac.

(b) Hãy chỉ ra rằng, Hamiltonian H giao hoán với toán tử $\sigma \cdot \mathbf{P}$ trong đó $\mathbf{P}$ là toán tử xung lượng và σ là toán tử ma trận spin Pauli trong không gian các spinor bốn thành phần.

(c) Hãy tìm nghiệm sóng phẳng của phương trình Dirac trong biểu diễn mà $\sigma \cdot \mathbf{P}$ có dạng chéo, ở đây $\mathbf{P}$ là giá trị riêng của toán tử xung lượng.

(Buffalo)

Lời giải:

(a)

$$\hat{H} = c\alpha \cdot \mathbf{P} + \beta mc^2 = c\alpha \cdot (-i\hbar\nabla) + \beta mc^2 ,$$

trong đó

$$\alpha = \begin{pmatrix}0 & \sigma\\ \sigma & 0\end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

là các ma trận Dirac.

(b) Viết

$$\alpha \cdot \mathbf{P} = \begin{pmatrix}0 & \sigma\\ \sigma & 0\end{pmatrix} \cdot \mathbf{P} = \begin{pmatrix}0 & \sigma \cdot \mathbf{P}\\ \sigma \cdot \mathbf{P} & 0\end{pmatrix}.$$

Bởi vì

$$\sigma \cdot \mathbf{P} = \sigma \cdot \mathbf{P}\mathbf{1} = \begin{pmatrix}\sigma \cdot \mathbf{P} & 0\\ 0 & \sigma \cdot \mathbf{P}\end{pmatrix},$$

$$[\sigma\cdot\mathbf{P},\ H] = \left[\begin{pmatrix}\sigma\cdot\mathbf{P} & 0\\ 0 & \sigma\cdot\mathbf{P}\end{pmatrix},\ c\begin{pmatrix}0 & \sigma\cdot\mathbf{P}\\ \sigma\cdot\mathbf{P} & 0\end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix}\mathbf{1} & 0\\ 0 & -\mathbf{1}\end{pmatrix}\right]$$

$$= c\left[\begin{pmatrix}\sigma\cdot\mathbf{P} & 0\\ 0 & \sigma\cdot\mathbf{P}\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}0 & \sigma\cdot\mathbf{P}\\ \sigma\cdot\mathbf{P} & 0\end{pmatrix}\right]$$

$$+ mc^2\left[\begin{pmatrix}\sigma\cdot\mathbf{P} & 0\\ 0 & \sigma\cdot\mathbf{P}\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}\mathbf{1} & 0\\ 0 & -\mathbf{1}\end{pmatrix}\right] = 0 + 0 = 0\,.$$

(c) Giả sử **P** hướng dọc theo trục z. Khi đó, vì $\sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$, ta có

$$\sigma\cdot\mathbf{P} = \begin{pmatrix}\sigma_z & 0\\ 0 & \sigma_z\end{pmatrix} P_z = \begin{pmatrix}1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1\end{pmatrix} P_z\,,$$

trong đó, những yếu tố ma trận không được viết rõ, đều bằng không. Khi đó, như đã chỉ ra trong **Bài tập 8032** nghiệm sóng phẳng của phương trình Dirac trong biểu diễn đó là $\begin{pmatrix}\alpha\\ 0\\ \gamma\\ 0\end{pmatrix} e^{iP_z z/\hbar}$ và $\begin{pmatrix}0\\ \beta\\ 0\\ \delta\end{pmatrix} e^{iP_z z/\hbar}$, trong đó α và γ, β và δ lấy hai tập giá trị khác nhau. Thay các hàm riêng vào phương trình Schrödinger

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi$$

ta có

$$\begin{cases} cP_z\gamma + mc^2\alpha = E\alpha\,,\\ cP_z\alpha - mc^2\gamma = E\gamma\,,\end{cases}$$

và hệ phương trình này cho

$$E_\pm = \pm\sqrt{m^2c^4 + P_z^2c^2}\,,$$

$$\psi = \begin{pmatrix}1\\ 0\\ \dfrac{E_\pm - mc^2}{cP_z}\\ 0\end{pmatrix} e^{i(P_z z - E_\pm t)/\hbar}\,;$$

và hệ

$$\begin{cases} -cP_z\delta + mc^2\beta = E\beta\,, \\ -cP_z\beta - mc^2\delta = E\delta\,, \end{cases}$$

sẽ cho

$$E_\pm = \pm\sqrt{m^2c^4 + P_z^2c^2}\,,$$

$$\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dfrac{mc^2 - E_\pm}{cP_z} \end{pmatrix} e^{i(P_z z - E_\pm t)/\hbar}\,.$$

8034

Xét một trường vô hướng thực tự do $\phi(x_\mu)$, trong đó $x_\mu = x, y, z$ với $\mu = 1, 2, 3$ và $x_4 = ict$, thỏa mãn phương trình Klein - Gordon.

(a) Hãy viết mật độ Lagrangian cho hệ.

(b) Sử dụng phương trình Euler - Lagrange, hãy kiểm tra rằng ϕ thỏa mãn phương trình Klein - Gordon.

(c) Hãy thu lại được mật độ Hamiltonian cho hệ. Hãy viết phương trình Hamiltonian và chứng tỏ rằng, chúng tương thích với phương trình suy ra từ câu (b).

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Mật độ Lagrangian là

$$\mathcal{L}(x) = -\frac{1}{2}\,\partial_\mu\phi(\mathbf{x})\partial_\mu\phi(\mathbf{x}) - \frac{m^2}{2}\,\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})\,.$$

(b) Sử dụng biểu thức nói trên cho $\mathcal{L}$ vào phương trình Euler - Lagrange

$$\partial_\mu\left[\frac{\partial\mathcal{L}(x)}{\partial(\partial_\mu\phi)}\right] - \frac{\partial\mathcal{L}(\mathbf{x})}{\partial\phi(\mathbf{x})} = 0$$

ta thu được

$$\partial_\mu\partial_\mu\phi(\mathbf{x}) - m^2\phi(\mathbf{x}) = 0\,,$$

đây chính là phương trình Klein - Gordon.

(c) Mật độ Hamiltonian của hệ là

$$\mathcal{H}(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)}\,\partial_\mu \phi - \mathcal{L} = -\frac{1}{2}\,\partial_\mu \phi \partial_\mu \phi + \frac{m^2}{2}\,\phi^2 \,.$$

Từ phương trình chính tắc Hamilton

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi} = -\partial_\mu P_\mu, \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_\mu} = -\partial_\mu \phi \,,$$

trong đó

$$P_\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)} = -\partial_\mu \phi \,,$$

ta được

$$-\partial_\mu P_\mu = m^2 \phi \,,$$

nghĩa là,

$$\partial_\mu \partial_\mu \phi - m^2 \phi = 0 \,,$$

giống như phương trình đã thu được ở câu (b).

8035

Ta có thể chỉ ra rằng, xác suất để cho một hạt tích điện thỏa mãn phương trình chuyển động với xung lượng P có thể phát xạ một photon ảo với xung lượng q là tỉ lệ với tenxơ hiệp biến

$$W_{\mu\nu} = A g_{\mu\nu} + B P_\mu P_\nu + C q_\mu q_\nu + D(q_\mu P_\nu + P_\mu q_\nu) \,,$$

trong đó A, B, C và D là các hàm vô hướng thực bất biến Lorentz của q^2, $q \cdot P$ và $P^2 = m^2$.

(a) Sử dụng sự bảo toàn dòng để chứng tỏ rằng $W_{\mu\nu}$ có dạng

$$W_{\mu\nu} = W_1 \left(g_{\mu\nu} - \frac{q_\mu q_\nu}{q^2} \right) + W_2 \left(P_\mu - q_\mu \frac{q \cdot P}{q^2} \right) \cdot \left(P_\nu - q_\nu \frac{q \cdot P}{q^2} \right) ,$$

nghĩa là, chỉ có hai trong A, B, C và D là độc lập.

(b) Hãy tính W_1 và W_2 đối với hạt Dirac khối lượng m mà

$$W_{\mu\nu} = Tr[(\not{P} - \not{q} + m)\gamma_\mu(\not{P} + m)\gamma_\nu] .$$

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Điều kiện bảo toàn dòng đòi hỏi $q^\mu W_{\mu\nu} = 0$, nghĩa là,

$$Aq_\nu + B(q \cdot P)P_\nu + Cq^2 q_\nu + D[q^2 P_\nu + (q \cdot P)q_\nu] = 0 .$$

trong đó $q \cdot P = q^\mu P_\mu$, $q_\nu = q^\mu g_{\mu\nu}$, v.v. Vì P_ν, q_ν là độc lập đối với $q^2 \neq 0$, điều này kéo theo

$$A + Cq^2 + D(q \cdot P) = 0 .$$

$$B(q \cdot P) + Dq^2 = 0 .$$

Giải cho C và D và viết $A = W_1$, $B = W_2$, ta có

$$D = -W_2 \frac{(q \cdot P)}{q^2} , \quad C = -\frac{W_1}{q^2} + \frac{W_2(q \cdot P)^2}{q^4} .$$

Do đó

$$W_{\mu\nu} = W_1 \left(g_{\mu\nu} - \frac{q_\mu q_\nu}{q^2} \right) + W_2 \left(P_\mu - q_\mu \frac{q \cdot P}{q^2} \right) \cdot \left(P_\nu - q_\nu \frac{q \cdot P}{q^2} \right) .$$

(b) Ta có

$$\begin{aligned} W_{\mu\nu} &= \mathrm{Tr}[(\not{P} - \not{q} + m)\gamma_\mu(\not{P} + m)\gamma_\nu] \\ &= \mathrm{Tr}[\not{P}\gamma_\mu\not{P}\gamma_\nu + \not{P}\gamma_\mu m\gamma_\nu - \not{q}\gamma_\mu\not{P}\gamma_\nu \\ &\quad - \not{q}\gamma_\mu m\gamma_\nu + m\gamma_\mu\not{P}\gamma_\nu + m\gamma_\mu m\gamma_\nu] , \end{aligned}$$

trong đó $\not{P} = P_\alpha\gamma^\alpha$, $\not{q} = q_\alpha\gamma^\alpha$. Ma trận Dirac thỏa mãn hệ thức phản giao hoán

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \equiv \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} ,$$

và do đó

$$\mathrm{Tr}(\gamma^\mu\gamma^\nu) = 4g^{\mu\nu} ,$$

$$\mathrm{Tr}(\gamma^{\mu_1}\gamma^{\mu_2}\cdots\gamma^{\mu_n}) = 0 \quad \text{đối với} \quad n = \text{lẻ},$$

$$\mathrm{Tr}(\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\lambda\gamma^\sigma) = 4(g^{\mu\nu}g^{\lambda\sigma} - g^{\mu\lambda}g^{\nu\sigma} + g^{\mu\sigma}g^{\nu\lambda}) .$$

Như vậy trong $W_{\mu\nu}$ những số hạng chứa một số lẻ γ sẽ bằng không. Xét

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(\not{P}\gamma_\mu\not{P}\gamma_\nu) &= \mathrm{Tr}(P_\alpha\gamma^\alpha g_{\mu\lambda}\gamma^\lambda P_\beta\gamma^\beta g_{\nu\sigma}\gamma^\sigma) \\ &= P_\alpha g_{\mu\lambda}P_\beta g_{\nu\sigma}\mathrm{Tr}(\gamma^\alpha\gamma^\lambda\gamma^\beta\gamma^\sigma) \\ &= 4P_\alpha g_{\mu\lambda}P_\beta g_{\nu\sigma}(g^{\alpha\lambda}g^{\beta\sigma} - g^{\alpha\beta}g^{\lambda\sigma} + g^{\alpha\sigma}g^{\lambda\beta}) \\ &= 4(P_\alpha\delta^\alpha_\mu P_\beta\delta^\beta_\nu - P^\beta P_\beta\delta^\sigma_\mu g_{\nu\sigma} + P_\alpha g^\alpha_\nu P_\beta\delta^\beta_\mu) \\ &= 4(P_\mu P_\nu - P^2 g_{\mu\nu} + P_\nu P_\mu)\,, \\ \mathrm{Tr}(\not{q}\gamma_\mu\not{P}\gamma_\nu) &= 4(\not{q}_\mu P_\nu - \mathbf{q}\cdot\mathbf{P}g_{\mu\nu} + g_\nu P_\mu)\,, \\ \mathrm{Tr}(m^2\gamma_\mu\gamma_\nu) &= m^2 g_{\mu\alpha}g_{\nu\beta}\mathrm{Tr}(\gamma^\alpha\gamma^\beta) \\ &= 4m^2 g_{\mu\alpha}g_{\nu\beta}g^{\alpha\beta} = 4m^2 g_{\mu\alpha}\delta^\alpha_\nu = 4m^2 g_{\mu\nu}\,.\end{aligned}$$

Khi đó, vì đối một hạt trên vỏ $P^2 \approx m^2$, ta có

$$W_{\mu\nu} = 4\mathbf{q}\cdot\mathbf{P}g_{\mu\nu} + 8P_\mu P_\nu - 4(q_\mu P_\nu + q_\nu P_\mu)\,.$$

Bằng cách so sánh với biểu thức đã cho đối với $W_{\mu\nu}$ ta tìm được

$$W_1 = 4\mathbf{q}\cdot\mathbf{P}, \quad W_2 = 8\,.$$

Chú ý rằng, đối với một hạt tích điện trên vỏ phát xạ một photon ảo, ban đầu $P^2 = m^2$, và cuối cùng $(\mathbf{P} - \mathbf{q})^2 = P^2 - 2\mathbf{q}\cdot\mathbf{P} + q^2 = m^2$, và do đó hai biểu thức cho $W_{\mu\nu}$ là tương thích.

8036

Để tính toán mômen từ dị thường của hạt, có thể dùng phương trình Dirac dưới đây:

$$(i\not{\nabla} - e\not{A} + K\frac{e}{4m}\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - m)\psi(x) = 0\,.$$

Ở đây, e và m là điện tích và khối lượng của hạt, K là một tham số không thứ nguyên, $A^\mu(x)$ là thế bốn chiều và $F^{\mu\nu}$ là tenxơ điện từ trường, nghĩa là

$$F^{\mu\nu} = \frac{\partial A^\mu}{\partial x_\nu} - \frac{\partial A^\nu}{\partial x_\mu}\,, \quad \sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]\,,$$

trong đó γ_μ là các ma trận Dirac, $\gamma_0 = \gamma^0 = \beta$, $\gamma^i = -\gamma_i = \beta\alpha^i$, $i = 1, 2, 3$.

(a) Ai cũng biết rằng, phương trình trên là hiệp biến nếu $K = 0$. Ta có

$$\psi'(x') = S\psi(x).$$

trong đó $x'^{\mu} = a^{\mu}_{\nu} x^{\nu}$ và $a^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu} = S^{-1}\gamma^{\mu} S$. Hãy chứng tỏ rằng nếu $K \neq 0$, phương trình vẫn hiệp biến.

(b) Hãy viết phương trình dưới dạng Hamiltonian và chỉ ra rằng, tương tác thêm vào không làm mất đi tính Hecmite của Hamiltonian.

(*Buffalo*)

Lời giải:

(a) Vì

$$S^{-1}\gamma_{\mu} S = a^{\nu}_{\mu}\gamma_{\nu}$$

và a^{ν}_{μ} giao hoán với S và γ, ta có

$$S^{-1}\gamma_{\mu} S a^{\mu}_{\alpha} = a^{\nu}_{\mu} a^{\mu}_{\alpha}\gamma_{\nu} = \delta^{\nu}_{\alpha}\gamma_{\nu} = \gamma_{\alpha}\,.$$

Xét

$$\begin{aligned}
\sigma'_{\alpha\beta} F'^{\alpha\beta}\psi'(x') &= \frac{i}{2}\left(\gamma_{\alpha}\gamma_{\beta} - \gamma_{\beta}\gamma_{\alpha}\right) a^{\alpha}_{\mu} a^{\beta}_{\nu} F^{\mu\nu} S\psi'(x) \\
&= \frac{i}{2}\left(SS^{-1}\gamma_{\alpha} SS^{-1}\gamma_{\beta} - SS^{-1}\gamma_{\beta} SS^{-1}\gamma_{\alpha}\right) a^{\alpha}_{\mu} a^{\beta}_{\nu} F^{\mu\nu} S\psi \\
&= S\,\frac{i}{2}\left(S^{-1}\gamma_{\alpha} S a^{\alpha}_{\mu} S^{-1}\gamma_{\beta} S a^{\beta}_{\nu} - S^{-1}\gamma_{\beta} S a^{\beta}_{\nu} S^{-1}\gamma_{\alpha} S a^{\alpha}_{\mu}\right) F^{\mu\nu}\psi \\
&= S\,\frac{i}{2}\left(\gamma_{\mu}\gamma_{\nu} - \gamma_{\nu}\gamma_{\mu}\right) F^{\mu\nu}\psi \\
&= S\sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu}\psi\,.
\end{aligned}$$

Như vậy

$$S^{-1}\sigma'_{\alpha\beta} F'^{\alpha\beta}\psi'(x') = \sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu}\psi(x).$$

Do đó, vì $\psi(x) = S^{-1}\psi'(x')$ và $\nabla\!\!\!/$ và $A\!\!\!/$ là bất biến, khi thực hiện biến đổi, phương trình Dirac trở thành

$$S^{-1}\left(i\nabla\!\!\!/ - eA\!\!\!/ + \frac{Ke}{4m}\sigma'_{\alpha\beta} F'^{\alpha\beta} + m\right)\psi'(x) = 0\,,$$

nghĩa là nó hiệp biến.

(b) Vì

$$\begin{aligned}
\nabla\!\!\!/ &= \gamma_{\alpha}\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} = \beta\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla\,, \\
&= \gamma_{\alpha} A^{\alpha} = \beta A^{0} + \gamma_{j} A^{j} = \beta A^{0} + \gamma_{j} g_{ji} A^{i} \\
&= \beta A^{0} - \boldsymbol{\gamma}\cdot\mathbf{A}\,,
\end{aligned}$$

phương trình Dirac có thể viết là

$$i\beta\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left(-i\gamma\cdot\nabla + e\beta A^0 - e\gamma\cdot\mathbf{A} - K\frac{e}{4m}\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + m\right)\psi\,.$$

Chú ý rằng, ta đã dùng hệ đơn vị $\hbar = c = 1$.

Nhân bên trái cả hai vế với β, vì $\beta^2 = 1$, $\beta\gamma_i = \beta^2\alpha_i = \alpha_i$, ta có phương trình dưới dạng Hamiltonian

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi\,,$$

trong đó

$$H = -i\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + eA^0 - e\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{A} - K\frac{e}{4m}\beta\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + m\beta\,,$$

với

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ là các ma trận Pauli và I là ma trận đơn vị. Từ định nghĩa

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2I\delta_{ij}\,.$$

$$(i, j = 1, 2, 3)$$

suy ra

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2I\delta_{ij},\ \{\beta, \alpha_i\} = 0\,,$$

và do đó

$$\{\gamma_i, \gamma_j\} = 2g_{ij}\,,$$

$$\{\beta, \gamma_i\} = 0\,.$$

Khi đó

$$[\beta, \sigma_{ij}] = \left[\beta, \frac{i}{2}(\gamma_i\gamma_j - \gamma_j\gamma_i)\right]$$

$$= \frac{i}{2}(\beta\gamma_i\gamma_j - \beta\gamma_j\gamma_i - \gamma_i\gamma_j\beta + \gamma_j\gamma_i\beta) = 0\,,$$

vì $\gamma_i\gamma_j\beta = -\gamma_i\beta\gamma_j = \beta\gamma_i\gamma_j$, v.v. và tương tự,

$$\{\beta, \sigma_{0i}\} = \frac{i}{2}(\beta[\beta, \gamma_i] + [\beta, \gamma_i]\beta) = 0\,.$$

Vì theo định nghĩa σ_i và β là Hecmite, $\gamma_0 = \beta$ là Hecmite và $\gamma_i = \beta\alpha_i$ là phản Hecmite. Khi đó σ_{ij} là Hecmite và σ_{0i}, σ_{i0} phản Hecmite. Như vậy

$$\begin{aligned}\sigma^+_{\mu\nu}\beta^+ &= \sigma^+_{ij}\beta^+ + \sigma^+_{i0}\beta^+ + \sigma^+_{0i}\beta^+ = \sigma_{ij}\beta - \sigma_{i0}\beta - \sigma_{0i}\beta \\ &= \beta\sigma_{ij} + \beta\sigma_{i0} + \beta\sigma_{0i} = \beta\sigma_{\mu\nu} .\end{aligned}$$

Từ đó, liên hợp Hecmite của số hạng tương tác phụ thêm là

$$\begin{aligned}\left(-K\frac{e}{4m}\beta\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\right)^+ &= -K^*\frac{e^*}{4m^*}\sigma^+_{\mu\nu}\beta^+F^{\mu\nu*} \\ &= -K\frac{e}{4m}\beta\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu} ,\end{aligned}$$

nếu chú ý rằng K, e, m và $F^{\mu\nu}$ là các số thực. Như vậy, tương tác phụ thêm là Hecmite, và nó không làm mất đi tính Hecmite của Hamiltonian gốc.

8037

Proton và nơtron có thể coi như hai trạng thái isospin của một hạt duy nhất, đó là nucleon. Kí hiệu proton là $|+\rangle$ và nơtron là $|-\rangle$ và định nghĩa toán tử sau đây

$$t_3|\pm\rangle = \pm\frac{1}{2}|\pm\rangle, \ t_\pm|\mp\rangle = |\pm\rangle, \ t_\mp|\mp\rangle = 0 .$$

Các toán tử $t_1 = \frac{1}{2}(t_+ + t_-)$, $t_2 = -\frac{i}{2}(t_+ - t_-)$, và t_3 có thể được diễn tả bằng một nửa ma trận Pauli 2×2. Chúng cùng nhau tạo thành một vectơ $\mathbf{t}$ trong không gian isospin.

Trong một mô hình đơn giản Hamiltonian cho một hệ của N nucleon, tất cả trong cùng một trạng thái không gian, là tổng của ba số hạng

$$H = NE_0 + C_1\sum_{i>j}\mathbf{t}_i\cdot\mathbf{t}_j + C_2Q^2 ,$$

trong đó E_0, C_1 và C_2 là các hằng số dương với $C_1 > C_2$, $\mathbf{t}_j$ là isospin của hạt nhân thứ i, và Q là điện tích toàn phần trong đơn vị e. Tổng được lấy theo tất cả các cặp nucleon.

(a) Hãy chứng tỏ rằng, $\sum_{i>j}\mathbf{t}_i\cdot\mathbf{t}_j = \frac{1}{2}\left[T(T+1) - \frac{3}{4}N\right]$, trong đó T là số lượng tử isospin toàn phần của hệ.

Trong phần còn lại của bài toán này cần nhớ kĩ rằng nơtron và proton là các hạt có spin 1/2 và thỏa mãn thống kê Fermi-Dirac.

(b) Hãy tìm các trạng thái riêng năng lượng và các giá trị riêng của hệ hai nucleon. Spin toàn phần của mỗi trạng thái là bao nhiêu?

(c) Hãy tìm các trạng thái riêng và giá trị riêng của một hệ bốn nucleon.

(d) Hãy tìm giá trị riêng năng lượng của hệ ba nucleon.

(*MIT*)

Lời giải:

(a) Vì $\mathbf{T}^2 = (\sum_i \mathbf{t}_i)^2$ có giá trị riêng $T(T+1)$ và $\mathbf{t}_i^2$ có giá trị riêng $\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)$, ta có

$$\sum_{i>j} \mathbf{t}_i \cdot \mathbf{t}_j = \frac{1}{2}\left[\left(\sum_{i=1}^{N} \mathbf{t}_i\right)^2 - \sum_{i=1}^{N} \mathbf{t}_i^2\right] = \frac{1}{2}\left[T(T+1) - \frac{3}{4}N\right].$$

(b) Một hệ của các hạt đồng nhất spin 1/2 phải có hàm sóng toàn phần phản đối xứng. Do đó, một hệ hai nucleon sẽ có các cấu trúc khả dĩ sau đây

Cấu hình	Trạng thái isospin	Trạng thái spin
$(p\,p)$	$\|+\rangle\|+\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\alpha\rangle\|\beta\rangle - \|\beta\rangle\|\alpha\rangle)$
$(n\,n)$	$\|-\rangle\|-\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\alpha\rangle\|\beta\rangle - \|\beta\rangle\|\alpha\rangle)$
$(p\,n)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|+\rangle\|-\rangle + \|-\rangle\|+\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\alpha\rangle\|\beta\rangle - \|\beta\rangle\|\alpha\rangle)$
$(p\,n)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|+\rangle\|-\rangle - \|-\rangle\|+\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\alpha\rangle\|\beta\rangle + \|\beta\rangle\|\alpha\rangle)$, $\|\alpha\rangle\|\alpha\rangle$, hoặc $\|\beta\rangle\|\beta\rangle$

Các giá trị riêng tương ứng sẽ là như sau

Cấu hình	T	S	Q	E
$(p\,p)$	1	0	2	$C_1 + 4C_2$
$(n\,n)$	1	0	0	C_1
$(p\,n)$	1	0	1	$C_1 + C_2$
$(p\,n)$	0	1	1	C_2

Trong phần trên, $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ diễn tả các trạng thái một hạt tương ứng với spin + và spin −, và E là năng lượng $(2E_0 - \frac{3}{4}C_1)$.

(c) Khi tính đến nguyên lý Pauli, có thể có nhiều nhất là hai proton và 2 neutron, mỗi cặp có spin ngược nhau, để tạo thành một trạng thái. Đối

với một sự sắp xếp $(pnpn)$ trạng thái spin sẽ có bốn dạng $(\alpha\alpha\beta\beta)$, $(\beta\beta\alpha\alpha)$, $(\alpha\beta\beta\alpha)$, $(\beta\alpha\alpha\beta)$. Đối với một sự sắp xếp khác, sẽ có các trạng thái spin tương tự. Tuy nhiên, trong trường hợp này hàm sóng toàn phần không thể diễn tả một cách đơn giản như tích của hàm sóng spin và hàm sóng isospin. Đối với những giá trị isospin khả dĩ $T = 2, 1, 0$, giá trị tương ứng của năng lượng là

$$E = 4E_0 + 4C_2 + \frac{3}{2}C_1, \quad 4E_0 + 4C_2 - \frac{1}{2}C_1,$$

$$4E_0 + 4C_2 - \frac{3}{2}C_1.$$

Nhưng vì hàm sóng không gian của bốn nucleon là như nhau và chỉ có hai trạng thái spin cho một nucleon, nguyên lý Pauli đòi hỏi isospin toàn phần của hệ phải là 0 và trạng thái năng lượng của nó chỉ có thể là trạng thái riêng

$$\psi(1,2,3,4) = \begin{pmatrix} |+\rangle_1\alpha_1 & |+\rangle_1\beta_1 & |-\rangle_1\alpha_1 & |-\rangle_1\beta_1 \\ |+\rangle_2\alpha_2 & |+\rangle_2\beta_2 & |-\rangle_2\alpha_2 & |-\rangle_2\beta_2 \\ |+\rangle_3\alpha_3 & |+\rangle_3\beta_3 & |-\rangle_3\alpha_3 & |-\rangle_3\beta_3 \\ |+\rangle_4\alpha_4 & |+\rangle_4\beta_4 & |-\rangle_4\alpha_4 & |-\rangle_4\beta_4 \end{pmatrix}.$$

(d) Cấu hình cho hệ ba nucleon là (ppn) hay (nnp), và isospin có thể $\frac{3}{2}$ hay $\frac{1}{2}$

Đối với (ppn):

$$E = 3E_0 + 4C_2 \pm \frac{3}{4}C_1.$$

đối với (nnp):

$$E = 3E_0 + C_2 + \frac{3}{4}C_1.$$

8038

Một phân tử có dạng một tam giác đều có thể bắt thêm một electron từ. Với một gần đúng tốt, electron đó có thể nằm ở một trong ba trạng thái trực giao ψ_A, ψ_B, ψ_C khu trú gần đỉnh của tam giác. Để có gần đúng tốt hơn, trạng thái riêng năng lượng của electron là tổ hợp tuyến tính của ψ_A, ψ_B, ψ_C xác định bằng một Hamiltonian hiệu dụng, sao cho, các giá trị trung bình của ψ_A, ψ_B, ψ_C là bằng nhau và các yếu tố ma trận của V_0 trong hệ cơ sở ψ_A, ψ_B, ψ_C cũng bằng nhau.

(a) Đối xứng đối với phép quay $2\pi/3$ có hệ quả gì đối với hệ số của ψ_A, ψ_B, ψ_C trong các trạng thái của Hamiltonian hiệu dụng? Tồn tại đối xứng

đối với hoán vị B và C; có thể cho thêm thông tin gì về giá trị riêng của Hamiltonian hiệu dụng?

(b) Ở thời điểm $t = 0$ một electron bị bắt giữ vào trạng thái ψ_A. Hãy tìm xác suất để nó ở ψ_A tại thời điểm t.

(*MIT*)

Lời giải:

(a) Dưới tác dụng của phép quay với một góc $2\pi/3$, ta có

$$R\psi_A = a\psi_B, \quad R\psi_B = a\psi_C, \quad R\psi_C = a\psi_A .$$

Khi đó, vì

$$R^2\psi_A = aR\,\psi_B = a^2\psi_C ,$$
$$R^3\psi_A = a^2R\,\psi_C = a^3\psi_A ,$$

ta có $a^3 = 1$ và do đó

$$a = 1,\ e^{\frac{i2\pi}{3}} \quad \text{và} \quad e^{\frac{i4\pi}{3}} .$$

Giả sử trạng thái riêng của Hamiltonian hiệu dụng là

$$\psi = a_1\psi_A + a_2\psi_B + a_3\psi_C .$$

Đối xứng đối với phép quay một góc $\frac{2\pi}{3}$ có nghĩa là $R\psi = \psi$, và như vậy

$$a_1a\psi_B + a_2a\psi_C + a_3a\psi_A = a_1\psi_A + a_2\psi_B + a_3\psi_C .$$

Khi đó, tính trực giao của ψ_A, ψ_B, ψ_C sẽ đòi hỏi

$$a_1a = a_2,\ a_2a = a_3,\ a_3a = a_1$$

Đối với $a = 1$ chọn $a_1 = 1$, đối với $a = \exp\left(i\frac{2\pi}{3}\right)$ chọn $a_1 = 1$, và đối với $a = \exp\left(i\frac{4\pi}{3}\right)$ chọn $a_2 = 1$, ta có ba tổ hợp

$$\psi^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}, \quad \psi^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\e^{i2\pi/3}\\e^{i4\pi/3}\end{pmatrix}, \quad \psi^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}e^{-i4\pi/3}\\1\\e^{i4\pi/3}\end{pmatrix} .$$

Chọn giá trị trung bình của H đối với các trạng thái riêng ψ_A, ψ_B, ψ_C là bằng 0, khi đó Hamiltonian hiệu dụng có thể diễn tả được bằng ma trận

$$H = \begin{pmatrix}0 & V & V\\V & 0 & V\\V & V & 0\end{pmatrix} .$$

Vì $H\psi^{(1)} = 2V\psi^{(1)}$, $H\psi^{(2)} = -V\psi^{(2)}$, $H\psi^{(3)} = -V\psi^{(3)}$, năng lượng tương ứng với $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \psi^{(3)}$ lần lượt là $2V, -V, -V$.

Có đối xứng đối với hoán vị B và C. Kí hiệu P toán tử hoán vị hai nguyên tử. Vì P không giao hoán với R, nó không thể biểu diễn được bằng ma trận chéo trong cơ sở $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \psi^{(3)}$. Tuy nhiên, $\psi^{(1)}$ là trạng thái riêng của P và $\psi^{(2)}, \psi^{(3)}$ là các trạng thái suy biến, cho dù không phải là trạng thái riêng của P. Cho nên P không ràng buộc một điều kiện nào cho giá trị riêng của H.

(b) Tại $t = 0$, ta có thể khai triển hàm sóng ψ_A như sau

$$\psi_A(0) = \frac{1}{\sqrt{3}}[\psi^{(1)} + \psi^{(2)} + e^{-i2\pi/3}\psi^{(3)}].$$

Tại thời điểm t muộn hơn ta có

$$\psi_A(t) = \frac{1}{\sqrt{3}}[e^{-i2Vt/\hbar}\psi^{(1)} + e^{+iVt/\hbar}\psi^{(2)} + e^{-i2\pi/3}e^{+iVt/\hbar}\psi^{(3)}].$$

Do đó, xác suất để một electron ban đầu ở trạng thái ψ_A, vẫn ở trạng thái ψ_A ở thời điểm t là

$$|\langle\psi_A(t)|\psi_A(0)\rangle|^2 = \left|\frac{1}{3}(e^{i2Vt/\hbar} + e^{-iVt/\hbar} + e^{i2\pi/3}e^{-iVt/\hbar}e^{-i2\pi/3})\right|^2$$
$$= \frac{1}{9}|e^{i3Vt/\hbar} + 2|^2 = \frac{1}{9}\left(5 + 4\cos\frac{3Vt}{\hbar}\right).$$

8039

Năng lượng của một phân tử là tổng động năng của các electron và của các hạt nhân với các năng lượng Coulomb khác nhau. Giả sử rằng, với một hàm sóng nhiều hạt cụ thể nào đó $\psi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N)$, giá trị trung bình của động năng là T và của thế năng là $-U (U > 0)$.

(a) Hãy tìm ước lượng biến phân của trạng thái năng lượng cơ bản sử dụng hàm sóng $\lambda^{3N/2}\psi(\lambda\mathbf{x}_1, \ldots, \lambda\mathbf{x}_N)$ trong đó λ là một tham số.

(b) Giả sử ψ là hàm sóng thực sự của trạng thái cơ bản và rằng năng lượng của trạng thái cơ bản là $-B (B > 0)$. Các giá trị của T và U khi đó là bao nhiêu?

(MIT)

Lời giải:

(a) Động năng trung bình T của một hệ được cho bằng tổng các số hạng

dạng

$$\frac{\frac{\hbar^2}{2m}\int \psi^*(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N)\,\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\psi(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N)d\mathbf{x}_1,\ldots,d\mathbf{x}_N}{\int \psi^*(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N)\psi(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N)d\mathbf{x}_1,\ldots,d\mathbf{x}_N}.$$

Khi hàm sóng thử được sử dụng, động năng trung bình T' được cho bởi tổng các số hạng dang

$$\frac{\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^{3N}\int \psi^*(\lambda\mathbf{x}_1,\ldots,\lambda\mathbf{x}_N)\,\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\psi(\lambda\mathbf{x}_1,\ldots,\lambda\mathbf{x}_N)d\mathbf{x}_1,\ldots,d\mathbf{x}_N}{\lambda^{3N}\int \psi^*(\lambda\mathbf{x}_1,\ldots,\lambda\mathbf{x}_N)\psi(\lambda\mathbf{x}_1,\ldots,\lambda\mathbf{x}_N)d\mathbf{x}_1,\ldots,d\mathbf{x}_N}$$

$$=\frac{\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2\int \psi^*(\lambda\mathbf{x}_1,\ldots,\lambda\mathbf{x}_N)\,\frac{\partial^2}{\partial(\lambda x_i)^2}\psi(\lambda\mathbf{x}_1,\ldots,\lambda\mathbf{x}_N)d\lambda\mathbf{x}_1,\ldots,d\lambda\mathbf{x}_N}{\int \psi^*(\lambda\mathbf{x}_1,\ldots,\lambda\mathbf{x}_N)\psi(\lambda\mathbf{x}_1,\ldots,\lambda\mathbf{x}_N)d\lambda\mathbf{x}_1,\ldots,d\lambda\mathbf{x}_N}$$

$$=\frac{\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}\int \psi^*(\mathbf{y}_1,\ldots,\mathbf{y}_N)\,\frac{\partial^2}{\partial y_i^2}\psi(\mathbf{y}_1,\ldots,\mathbf{y}_N)d\mathbf{y}_1,\ldots,d\mathbf{y}_N}{\int \psi^*(\mathbf{y}_1,\ldots,\mathbf{y}_N)\psi(\mathbf{y}_1,\ldots,\mathbf{y}_N)d\mathbf{y}_1,\ldots,d\mathbf{y}_N}.$$

trong đó $y_1 = \lambda\mathbf{x}_1$, v.v. Từ đó, ta có $T' = \lambda^2 T$. Tương tự, $-U$ sẽ được cho bằng tổng các số hạng kiểu

$$\frac{e_i e_j\int \psi^*(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N)\,\frac{1}{|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|}\,\psi(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N)d\mathbf{x}_1,\ldots,d\mathbf{x}_N}{\int \psi^*(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N)\psi(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N)d\mathbf{x}_1,\ldots,d\mathbf{x}_N}$$

và do đó $-U' = -\lambda U$. Như vậy, giá trị trung bình của năng lượng là

$$E(\lambda) = \lambda^2 T - \lambda U.$$

Đối với trạng thái cơ bản, $\frac{dE(\lambda)}{d\lambda} = 0$, sẽ cho $\lambda = \frac{U}{2T}$. Do vậy, ước lượng biến phân đối với năng lượng của trạng thái cơ bản là

$$E = -\frac{U^2}{4T}.$$

(b) Nếu ψ là hàm sóng thực sự của trạng thái cơ bản, thì $\lambda = 1$. Như vậy,

$$U = 2T \qquad \text{và} \qquad E = T - U = -T.$$

Vì $E = -B$, ta có

$$T = B,\ U = 2B.$$

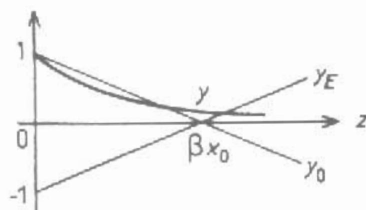
8040

Trong một phân tử hai nguyên tử, chuyển động hạt nhân nói chung chậm hơn rất nhiều so với của electron, dẫn đến có thể sử dụng gần đúng đoạn nhiệt.

Điều này về mặt thực tiễn có nghĩa là hàm sóng của electron tại mọi thời điểm đều thu được đối với vị tri tức thời của proton. Một phiên bản khác rất lý tưởng của phân tử hydro bị ion hóa một lần được bảo đảm bằng Hamiltonian electron một chiều

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - g\delta(x - x_0) - g\delta(x + x_0),$$

trong đó $\pm x_0$ là tọa độ của proton.



Hình 8.10

(a) Tìm hàm riêng và giá trị riêng cho tất cả các trạng thái liên kết đối với một x_0 bất kì? Bạn có thể biểu diễn giá trị riêng theo phương trình siêu việt. Hãy tìm kết quả giải tích cho những trường hợp giới hạn $\frac{mgx_0}{\hbar^2} \gg 1$ và $\frac{mgx_0}{\hbar^2} \ll 1$.

(b) Giả sử các proton (khối lượng $M \gg m$) chuyển động đoạn nhiệt và có thế đẩy $V(2x_0) = g/200x_0$ tác động giữa chúng. Hãy tính gần đúng khoảng phân cách cân bằng giữa các proton.

(c) Hãy tính gần đúng tần số dao động điều hòa của các proton quanh vị trí cân bằng. Gần đúng đoạn nhiệt có đúng không?

(MIT)

Lời giải:

(a) Phương trình Schrödinger có thể viết là

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \beta[\delta(x - x_0) + \delta(x + x_0)]\psi = k^2\psi, \qquad (1)$$

trong đó $\beta = \frac{2mg}{\hbar^2}$, $k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$ bởi vì E là âm đối với các trạng thái liên kết.

Với $x \neq \pm x_0$, phương trình trở thành $\frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2\psi$. Hơn nữa, bởi vì H là bất biến đối với phép nghịch đảo không gian, các trạng thái riêng sẽ có hai loại, với tính chẵn lẻ âm và dương như sau

Chẵn lẻ âm:

$$\psi(x) = \begin{cases} \sinh kx, & 0 \le x \le x_0 , \\ ae^{-kx}, & x_0 \le x , \end{cases}$$

Chẵn lẻ dương:

$$\psi(x) = \begin{cases} \cosh kx, & 0 \le x \le x_0 , \\ be^{-kz}, & x_0 \le x , \end{cases}$$

trong đó a, b là hằng số. Tích phân cả hai vế của phương trình (1) từ $x_0 - \varepsilon$ đến $x_0 + \varepsilon$ và đặt $\varepsilon \to 0$, ta được

$$\psi'(x_0 + \varepsilon) - \psi'(x_0 - \varepsilon) + \beta\psi(x_0) = 0 .$$

Tính liên tục của ψ khi qua x_0 đòi hỏi

$$\psi(x_0 + \varepsilon) = \psi(x_0 - \varepsilon) .$$

Hai điều kiện này sẽ dẫn đến hệ thức cho trường hợp chẵn lẻ âm,

$$e^{-2kx_0} = 1 - \frac{2kx_0}{\beta x_0} ,$$

còn cho trường hợp chẵn lẻ dương là,

$$e^{-2kx_0} = -1 + \frac{2kx_0}{\beta x_0} .$$

Như được vẽ trên Hình 8.10, k và do đó giá trị riêng E được cho bởi giao điểm của $y = e^{-z}$ hay với

$$y_0 = 1 - \frac{z}{\beta x_0} \qquad \text{hay với} \qquad y_E = -1 + \frac{z}{\beta z_0} .$$

trong đó $z = 2kx_0$. Khi $\beta x_0 \ll 1$, bởi vì

$$\left|\frac{dy_0}{dz}\right| = \frac{1}{\beta x_0} \gg \left|\frac{dy}{dz}\right| \approx 1 ,$$

y và y_0 không cắt nhau và chỉ có nghiệm cho chẵn lẻ dương. Trong trường hợp này, giao điểm xảy ra ở z nhỏ được cho bởi

$$1 - z \approx -1 + \frac{z}{\beta x_0} ,$$

hay $z \approx 2\beta x_0(1-\beta x_0)$, nghĩa là $k \approx \beta(1-\beta x_0)$.

Như vậy

$$E \approx -\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}(1-\beta x_0)^2 .$$

Khi $\beta x_0 \gg 1$, giao nhau xảy ra ở gần $z \approx \beta x_0$. Sử dụng kết quả này ta sẽ có đối với tương ứng chẵn lẻ âm và dương là

$$k \approx \frac{\beta}{2}(1 \mp e^{-\beta x_0}),$$

và do đó

$$E \approx -\frac{\hbar^2\beta^2}{8m}(1 \mp e^{-\beta x_0})^2 .$$

Chú ý rằng, đối với chẵn lẻ âm, năng lượng

$$E \approx -\frac{\hbar^2\beta^2}{8m}(1 - e^{-\beta x_0})^2$$

sẽ giảm khi x_0 tăng, ngay cả trước khi ta xét đến lực đẩy giữa các proton. Do đó, hệ không bền và trạng thái không phải là trạng thái liên kết. Như vậy, trong cả hai trường hợp giới hạn, chỉ có nghiệm với tính chẵn lẻ dương là thỏa mãn.

(b) Năng lương toàn phần của hệ, kể cả proton là

$$\langle H \rangle = E_e + T_p + V_p ,$$

trong đó E_e là năng lượng của electron thu được trước đây cho chẵn lẻ dương, $T_p \approx 0$ trong gần đúng đoạn nhiệt, và $V_p = \frac{g}{200x_0}$.

Khoảng phân cách cân bằng $\bar{x}_0$ của các proton được cho bởi

$$\frac{d}{dx_0}\langle H \rangle|_{\bar{x}_0} = 0 ,$$

do đó ta được

$$100(\beta\bar{x}_0)^2(1 + e^{-\beta\bar{x}_0}) = e^{\beta\bar{x}_0} .$$

Nếu $\beta x_0 \ll 1$, ta có

$$(\beta\bar{x}_0)^2(2-\beta\bar{x}_0) \approx \frac{1}{100} ,$$

hay

$$\bar{x}_0 \approx \frac{1}{10\sqrt{2}\beta} .$$

Nếu $\beta x_0 \gg 1$, ta có

$$100(\beta\bar{x}_0)^2 \approx e^{\beta\bar{x}_0} .$$

Xét

$$h''(\bar{x}_0) \equiv \frac{d^2}{dx_0^2}\langle H\rangle|_{\bar{x}_0} = -\frac{g}{2}\beta^3\left(1+2e^{-\beta\bar{x}_0}\right)e^{-\beta\bar{x}_0} + \frac{g}{100\bar{x}_0^3} .$$

Đối với $\beta x_0 \ll 1$, ta có

$$h''(\bar{x}_0) \approx \frac{g}{100\bar{x}_0^3}\left[1-150(\beta\bar{x}_0)^3\right] \simeq \frac{g}{100\bar{x}_0^3} > 0 ,$$

và cân bằng là bền. Đối với $\beta x_0 \gg 1$ ta có

$$h''(\bar{x}_0) \approx -\frac{g}{200\bar{x}_0^3}(\beta\bar{x}_0 - 2) < 0 ,$$

và cân bằng là không bền. Như vậy, khoảng phân cách cân bằng là

$$\bar{x}_0 \approx \frac{1}{10\sqrt{2}\beta} .$$

(c) Xét trường hợp cân bằng bền $\beta x_0 \ll 1$. Độ cứng là

$$K = h''(\bar{x}_0) \approx 20\sqrt{2}g\beta^3 ,$$

và do đó tần số dao động là

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{m}} = \frac{4\times 200^{1/4}\, mg^2}{\hbar^3} .$$

Vì động năng của proton cỡ

$$T_p = \frac{1}{2}K\bar{x}_0^2 \approx \frac{g\beta}{10\sqrt{2}}$$

trong khi năng lượng của electron là

$$|E_e| \approx \frac{\hbar^2\beta^2}{2m} = g\beta .$$

ta có $T_p \ll |E_e|$ và gần đúng đoạn nhiệt được thỏa mãn, nghĩa là proton có thể coi như là đứng yên.

Chịu trách nhiệm xuất bản:
Chủ tịch HĐQT kiêm Tổng Giám đốc NGÔ TRẦN ÁI
Phó Tổng Giám đốc kiêm Tổng biên tập NGUYỄN QUÝ THAO

Tổ chức bản thảo và chịu trách nhiệm nội dung:
Phó Tổng biên tập NGÔ ÁNH TUYẾT
Giám đốc Công ty Sách dịch và Từ điển Giáo dục NGUYỄN NHƯ Ý

Biên tập lần đầu:
PHẠM VĂN THIỀU
ĐỖ THỊ TỐ NGA

Biên tập tái bản:
ĐẶNG VĂN SỬ

Xử lý bìa:
HOÀNG ANH TUẤN

Sửa bản in:
CÔNG TY CP SÁCH DỊCH VÀ TỪ ĐIỂN GIÁO DỤC

Chế bản
NGUYỄN HỮU ĐIỂN

BÀI TẬP VÀ LỜI GIẢI CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

Mã số: 8Z079z0-SBQ

In 1000 cuốn (QĐ: 3397/QĐ-GD), khổ 16 x 24cm,
tại Công ty cổ phần In Phúc Yên - Đường Trần Phú, TX. Phúc Yên
Số xuất bản: 114-2010/CXB/50-129/GD.
In xong và nộp lưu chiểu tháng 9 năm 2010

Bài tập và lời giải của các
Trường Đại học nổi tiếng Hoa Kỳ

Bộ sách gồm 7 cuốn:

Bài tập và lời giải

1. Cơ học
2. Cơ học lượng tử
3. Quang học
4. Nhiệt động lực học và vật lý thống kê
5. Điện từ học
6. Vật lý nguyên tử, hạt nhân và các hạt cơ bản
7. Vật lý chất rắn, thuyết tương đối và các vấn đề liên quan

Bộ sách tuyển chọn 2550 bài tập từ các bài thi kiểm tra chất lượng và kiểm tra đầu vào của các trường đại học nổi tiếng ở Hoa Kỳ, bao quát toàn diện các vấn đề của vật lý học. Các câu hỏi trải rộng trên nhiều chủ đề, có những bài vận dụng nhiều lĩnh vực khác nhau của vật lý, áp dụng linh hoạt nhiều nguyên lý và định luật vật lý, đưa ra các tình huống sát thực và cập nhật, không đòi hỏi nhiều các kỹ năng về toán.

Các lời giải được đưa ra để gợi ý sinh viên tự giải quyết vấn đề hơn là hướng dẫn thao tác từng bước.

Bộ sách là tài liệu tham khảo quý bổ trợ cho các sách giáo khoa, giáo trình chuyên ngành vật lý.



Công ty cổ phần Sách dịch và Từ điển Giáo dục
25 Hàn Thuyên - Hai Bà Trưng - Hà Nội
Tel/Fax: 04.39726508 - 04.38266359
www.tudiengiaoduc.com.vn
Mua sách tại: www.sach24.vn; www.vinabook.com





Giá: 112.000 đ